

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

На правах рукописи

Багмутов Александр Сергеевич

**Спектральный анализ систем с
взаимодействиями на множествах нулевой меры**

Научная специальность: 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., профессор,
Попов Игорь Юрьевич

Санкт-Петербург

2023

Содержание

Введение	4
Глава 1. Возмущение типа гофрированная граница . . .	11
1.1 Резонатор с гофрированной границей	12
1.1.1 Описание общей задачи	12
1.1.2 Результаты из теории вариационного исчисления	13
1.1.3 Обзор существующих результатов	16
1.1.3.1 Система с одним резонатором	16
1.1.3.2 Система с конечным количеством резонаторов	17
1.1.3.3 Система с бесконечным количеством резонаторов	21
1.1.4 Модель точечных отверстий: теоретическая часть	26
1.1.5 Модель точечных отверстий: гофрированная граница	29
1.1.6 Граница из полос	32
1.1.7 Граница из полос: Численные результаты	39
1.1.8 Асимптотики для границы из квадратных резонаторов и числен- ные расчеты	42
1.2 Полупрозрачный гофрированный барьер	47
1.2.1 Асимптотики для полупрозрачного барьера с малым отверстием .	47
1.2.2 Барьер из полос	52
1.2.3 Барьер из полос: Численные расчеты	59
1.2.4 Выводы	62
Глава 2. Потенциалы сосредоточенные на одномерных множествах	63
2.1 Обзор существующих результатов	65
2.1.1 Резольвента оператора с сингулярными взаимодействиями	65
2.1.2 Сингулярные взаимодействия как обобщенные граничные условия	68
2.1.3 Метод Бирмана-Швингера	70
2.1.4 Связанные состояния искривленного провода в \mathbb{R}^2	72

2.1.5	Связанные состояния искривленного провода в \mathbb{R}^3	74
2.2	Потенциал на параллельных прямых в 2D	75
2.2.1	Непрерывный спектр	77
2.2.2	Тестовые функции	78
2.2.3	Существование связанных состояний	81
2.2.4	Результаты	82
2.3	Потенциал на прямой в 3D	83
2.3.1	Гамильтониан для провода в 3D	83
2.3.2	Существование связанных состояний	85
2.3.3	Верхняя граница для числа связанных состояний	87
2.3.4	Дополнение: Транспортные характеристики системы из двух одномерных колец в \mathbb{R}^3	88
2.3.5	Выводы	94
Глава 3.	Два проводящих слоя в \mathbb{R}^3	95
3.1	Пара проводящих слоев: Аналитические результаты	95
3.1.1	Описание модели	97
3.1.2	Построение Гамильтониана	98
3.1.3	Существование дискретного спектра	99
3.2	Пара проводящих слоев: Численные расчеты	100
3.2.1	Метод Хартри-Фока	100
3.2.2	Основные результаты	103
3.2.3	Дополнительные результаты	105
3.3	Классификация связанных состояний проводящих слоев	107
3.3.1	Построения	107
3.3.2	Выводы	112
3.4	Заключение	113

Введение

В данной работе рассматривается ряд квантово-механических систем, которые содержат взаимодействия на множествах меры нуль. Для таких систем мы изучаем зависимость от параметров системы различных спектральных характеристик, в частности, существование связанных состояний, их энергии и положение непрерывного спектра. При исследовании используются как аналитические, так и численные методы.

Объектом диссертационного исследования являются спектральные свойства ряда квантово-механических систем с сингулярными взаимодействиями в двух и трех измерениях. Предмет исследования – математические модели, описывающие обозначенные системы.

Целью диссертационного исследования является проведение спектрального анализа операторов Лапласа с сингулярными взаимодействиями, для ряда систем с различной геометрией как двухмерных, так и трехмерных.

Для достижения этой цели в диссертации были сформулированы и решены следующие задачи:

1. Найдены предельные граничные условия для волновой функции в области с границей, гофрированной полосами, а также для области с полупрозрачным барьером из гофрированных полос. (Здесь и далее, гофрированными называются границы с возмущением в виде присоединения через малые отверстия множества малых резонаторов Гельмгольца.)
2. Получено численное подтверждение результатов для указанных систем и приведен характер сходимости последовательности задач к предельной.
3. Для двух систем из квантовых негерметичных проводов с вариацией интенсивности потенциала получены несколько аналитических теорем о спектре, в том числе теоремы о существовании связанных состояний.
4. Для системы из двух проводящих слоев численно исследована зависимость собственных энергий системы от ее параметров, в том числе от формы отверстия. Создана классификация связанных состояний по количеству и расположению зон знакопостоянства.

Теоретическая и практическая значимость работы. Физические эффекты, возникающие при переходе к нано-масштабам, радикально отличаются от явлений макромира и чрезвычайно интересны с точки зрения как фундаментальной физики, так и приложений микроэлектронных устройств.

В настоящей работе доказывается ряд аналитических утверждений: для систем с негерметичными квантовыми проводами (глава 2) - существование связанных состояний и ограничение на их количество, а для областей с гофрированной границей и барьером доказывается сходимости к конкретному предельному граничному условию.

Рассматриваемые системы в дальнейшем должны применяться при разработке нано-систем в качестве моделей. Мы подтверждаем аналитические результаты численными расчетами и приводим вид собственных функций систем, что позволяет построить интуицию, необходимую для дальнейшей практической деятельности.

Методы исследования. В данной работе мы применяем методы теории линейных операторов как классические, так и более новые. Для численных расчетов мы используем пакет FreeFEM++, а также систему Wolfram Mathematica.

Актуальность. Тема работы очень актуальна, так как рассматриваемые системы являются моделями для физических систем проводящего типа, таких как нано-волноводы, проводящие слои и т.д., а также моделью взаимодействующих молекул ДНК. Спектр операторов, которые описывают модели, исследуемые в работе, является важнейшей характеристикой системы, определяющей набор возможных состояний системы и их уровни энергии.

Полученные результаты могут быть полезны при решении различных физических задач, связанных с поведением заряженных частиц в низкоразмерных системах, таких как нанотрубки, нанопровода, а также в проводящих слоях. Другой физической системой, которую можно моделировать с помощью сингулярных потенциалов, является система из двух взаимодействующих линейных молекул (такие системы рассмотрены в главе 2).

Научная новизна. В работе рассматриваются системы с новой геометрией, такие как область с границей и барьером, образованной системой открытых резонаторов и непостоянные потенциалы, сосредоточенные на линиях, для которых получаются новые результаты. Для системы из параллельных

проводящих слоев предлагается новая классификация собственных состояний, связанная с теоремой Куранта об узлах собственных функций (Courant nodal theorem).

Степень достоверности результатов данной работы обеспечена аналитическим доказательством с использованием общепринятых математических методов. Многие из предложенных результатов проверяются численно.

Апробация результатов работы. Основные результаты диссертационного исследования были представлены на 7 научных конференциях, из них 4 международных и 3 всероссийских:

1. XI Конгресс молодых ученых (КМУ) (04.04.2022 - 06.04.2022)
2. Analytic and Algebraic Methods in Physics XVIII (01.09.2021 - 03.09.2021)
3. XV Международная научная конференция "Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании" (15.07.2021 - 18.07.2021)
4. X Конгресс молодых ученых (КМУ) (14.04.2021 - 17.04.2021)
5. IX Конгресс молодых ученых (КМУ) (15.04.2020 - 18.04.2020)
6. 17th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics. ICNAAM 2019 (23.09.2019 - 28.09.2019)
7. Mathematical Challenge of Quantum Transport in Nanosystems, "Pierre Duclos Workshop" (19.09.2019 - 20.09.2019)

Публикации.

По теме диссертационного исследования опубликованы 11 работ в журналах, из них 8 публикаций индексируются в наукометрических базах Web of Science и Scopus, 3 публикации - в перечнях ВАК или РИНЦ.

Публикации, входящие только в перечни ВАК, РИНЦ:

1. Багмутов А.С., Попов И.Ю. Вольт-амперные характеристики для двух систем квантовых волноводов с присоединенными квантовыми резонаторами // Научно-технический вестник информационных технологий, меха-

ники и оптики [Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics] - 2016. - Т. 16. - № 4(104). - С. 725-730.

2. Bagmutov A.S., Popov I.Y. Bound states for two delta potentials supported on parallel lines on the plane // Physics of Complex Systems - 2022, Vol. 3, No. 1, pp. 37-42.
3. Багмутов А.С., Попов И.Ю. Спектр лапласиана в области с границей и барьером, составленными из малых резонаторов // Математическая физика и компьютерное моделирование - 2022. - Т. 25. - № 4. - С. 29-43.

Публикации, индексируемые в наукометрических базах Web of Science/Scopus:

1. Vorobiev A.M., Bagmutov A.S., Popov A.I. On formal asymptotic expansion of resonance for quantum waveguide with perforated semitransparent barrier // Наносистемы: Физика, химия, математика = Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2019, Vol. 10, No. 4, pp. 415-419.
2. Bagmutov A.S., Popov I.Y. Window-coupled nanolayers: window shape influence on one-particle and two-particle eigenstates // Наносистемы: Физика, химия, математика = Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2020, Vol. 11, No. 6, pp. 636-641.
3. Popov I.Y., Bagmutov A.S., Melikhov I.F., Najjar H. Numerical analysis of multi-particle states in coupled nano-layers in electric field // AIP Conference Proceedings - 2020, Vol. 2293, pp. 360006.
4. Smolkina M.O., Popov I.Y., Bagmutov A.S., Blinova I.V. The electron transmission properties in a non-planar system of two chained rings // Journal of Physics: Conference Series - 2021, Vol. 2086, No. 1, pp. 012211.
5. Bagmutov A.S. Bound states for laplacian perturbed by varying potential supported by line in R^3 // Наносистемы: Физика, химия, математика = Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2021, Vol. 12, No. 5, pp. 549-552.

6. Bagmutov A.S., Najar H., Melikhov I.F., Popov I.Y. On the discrete spectrum of a quantum waveguide with Neumann windows in presence of exterior field // Наносистемы: Физика, химия, математика = Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2022, Vol. 13, No. 2, pp. 156-164.
7. Трифанова Е.С., Багмутов А.С., Катасонов В.Г., Попов И.Ю. Asymptotic Expansions of Resonances for Waveguides Coupled through Converging Windows // Челябинский физико-математический журнал [Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal] - 2023. - Т. 8. - № 1. - С. 72-82
8. Trifanova E.S., Bagmutov A.S., Popov I.Yu. Resonator with a Corrugated Boundary: Numerical Results // Physics of Particles and Nuclei Letters - 2023, Vol. 20, No. 2, pp. 96-99

Участие в научно-исследовательских проектах.

Данное диссертационное исследование подготовлено при поддержке следующих научно-исследовательских проектов:

1. Грант КНВШ 2020 г., проект: "Многочастичные задачи в квантовых волноводах".
2. Грант "Аспиранты"РФФИ 2020 г. проект №20-31-90050, "Спектральный анализ систем с взаимодействиями, сосредоточенными на множествах нулевой меры".

Положения, выносимые на защиту:

1. Для Гамильтониана с граничными условиями Неймана геометрическое возмущение границы области посредством присоединения через малые отверстия N резонаторов Гельмгольца фиксированной длины в пределе $N \rightarrow \infty$ приводит к энерго-зависящему граничному условию типа Робена.
2. При возмущении Лапласиана с граничным условием Неймана посредством барьера из N резонаторов Гельмгольца фиксированной длины, соединенных с разделяемыми областями через малые отверстия, в пределе $N \rightarrow \infty$ граничное условие на барьере сходится к полученным в работе энерго-зависящим условиям, связывающим граничные значения функций и их нормальных производных.

3. Для двумерной квантовой системы с сосредоточенным на двух параллельных прямых дельта-потенциалом, имеющем постоянную интенсивность на всей протяженности, за исключением конечной области на каждой прямой, существует как минимум одна точка дискретного спектра ниже границы непрерывного спектра.
4. Для трехмерной квантовой системы с дельта-потенциалом постоянной интенсивности, сосредоточенном на прямой, и вариацией интенсивности на конечном отрезке, существует по крайней мере одна точка дискретного спектра и количество точек дискретного спектра ограничено сверху интегралом, зависящем от параметров системы.
5. При рассмотрении связанных состояний системы из двух параллельных проводящих слоев в 3D, соединенных через окна расположенные в ограниченной области, функции со сходным количеством и расположением зон знакопостоянства в сечении вдоль плоскости окна при непрерывном изменении формы окна претерпевают непрерывное изменение, со стабильным и предсказуемым для каждого типа изменением их уровней энергии.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения, содержит 34 рисунка. Список литературы содержит 117 наименований.

Работа разделена на три главы, каждая из которых рассматривает отдельный класс систем с некоторыми геометрическими особенностями. В качестве естественного контекста для рассматриваемых дифференциальных уравнений принимается квантовая механика, и оператор интерпретируется как Гамильтониан некоторой квантовой системы, но большинство результатов распространяются на общий случай волновых сред.

В первой главе рассматривается определенное геометрическое возмущение границы области в виде нескольких присоединенных через малые отверстия резонаторов Гельмгольца. Конкретно, нас интересует случай, когда количество присоединенных резонаторов стремится к бесконечности, а площадь каждого из них стремится к нулю. Такой тип возмущения называют "гофрированной границей". В результате подобного предельного перехода, граничное условие задачи

превращается в некоторое (в общем случае энергозависимое) граничное условие, напоминающее сингулярный дельта потенциал.

Для указанных систем основной задачей является вывод предельной задачи с использованием приближения точечных отверстий и проведение соответствующего результатам численного анализа. Также нами предлагается применение концепции гофрированных границ при конструировании полупрозрачного барьера, на примере системы с барьером из резонаторов-полос.

Во второй главе мы переходим к рассмотрению более классических возмущений систем в виде дельта-потенциалов, сосредоточенных на одномерных множествах, в пространствах \mathbb{R}^2 и \mathbb{R}^3 . Такие системы в источниках часто называют протекающие или негерметичные квантовые провода (leaky quantum wires). Здесь задачей является доказательство ряда утверждений о спектре оператора, в частности нас интересует существование и количество связанных состояний системы.

Последняя глава сосредоточена на численных исследованиях семейства систем со следующей геометрией: в трехмерном пространстве расположены два параллельных неограниченных проводящих слоя с общей границей, в которой присутствует набор отверстий некоторой формы. Кроме того, рассматривается случай с приложением внешнего поперечного электрического поля. Для таких систем мы решаем одночастичную и многочастичную задачи на собственные функции. При решении многочастичной задачи используется приближение многочастичной волновой функции Хартри-Фока, в котором каждая частица представляется для других частиц как внешнее поле с дельта-потенциалом. С использованием численного метода конечных элементов мы строим собственные функции оператора и проводим анализ зависимости характеристик связанных состояний от параметров системы. По результатам предлагается классификация связанных состояний для подобных систем, основанная на количестве и взаимном расположении зон знакопостоянства функций.

Глава 1. Возмущение типа гофрированная граница

В данной главе рассматривается задача на собственные значения оператора Лапласа с граничными условиями Неймана для некоторой двумерной области, часть границы которой претерпевает нерегулярное возмущение, вследствие которого граничное условие Неймана на данной части границы эффективно меняется на энерго-зависящее условие Робена. Во введении кратко описывается решаемая задача и методы, затем будет представлен необходимый контекст из существующих результатов и затем представлены результаты работы.

Задачи, связанные с влиянием геометрических возмущений границ области на спектр оператора, широко освещены в литературе [6, 7, 11, 12, 13, 14]. Конкретно возмущения с помощью резонаторов Гельмгольца привлекают интерес из-за резонансных эффектов полости, простоты описания, возможности физической реализации и разработанных методов исследования таких систем. Результаты получаются с использованием вариационных методов или прямого анализа асимптотик [23, 24, 25, 26, 1, 9, 4], а также приближенной модели точечных отверстий [15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22]. Системы, содержащие неограниченно-возрастающее количество резонаторов, присоединенных к одной из границ, рассматривались в работах [8, 27, 9, 10]. Границы области с такими возмущениями именуют **гофрированными** границами. Результаты представленные в настоящей работе опубликованы в [3, 5].

Существует множество областей практического применения теории возмущений резонаторами Гельмгольца, таких как наноэлектроника, использующая волноводы в масштабах нанометров, при которых проявляются квантовые эффекты, или акустические приборы решающие такие задачи как шумоподавление [30] и т.д. В частности, интересующие нас поверхности, заполненные большими количествами резонаторов, создающими особые граничные условия, в настоящее время активно исследуются в рамках области метаматериалов [28, 29].

1.1 Резонатор с гофрированной границей

1.1.1 Описание общей задачи

Рассмотрим односвязную область Ω_0 на плоскости \mathbb{R}^2 , $\partial\Omega$ - граница этой области. Часть границы области обозначим $\Gamma \subseteq \partial\Omega_0$ - возмущение границы будет происходить на этой части. На области Ω_0 определен оператор Лапласа с граничными условиями Неймана:

$$-\Delta_0 u = -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

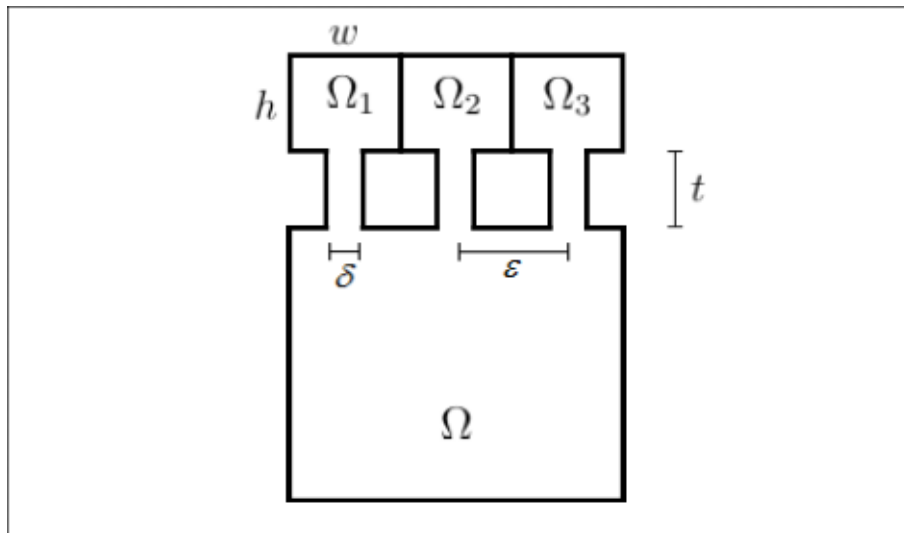


Рисунок 1 – Пример геометрии системы с гофрированной границей

Далее описывается возмущенная система, пример которой изображен на рисунке 1. Введем семейство областей Ω_ϵ , где введена параметризация малым параметром ϵ . Эти области совпадают с изначальной областью всюду, за исключением границы Γ , где через коридоры (отверстия) присоединяются малые резонаторы Гельмгольца Ω_i . Параметр ϵ характеризует расстояние между соседними отверстиями в границе Γ , ведущими к резонаторам Гельмгольца. В областях Ω_ϵ определены операторы Лапласа с граничными условиями Неймана.

Также при описании существующих результатов мы будем использовать следующие обозначения для идентичных параметров системы: w и h обозначают ширину и высоту резонатора Гельмгольца, в случаях когда рассматривают-

ся прямоугольные резонаторы, δ - обозначает ширину отверстия или ширину туннеля, связывающего резонатор с основной областью, в тех случаях когда она постоянна на протяжении туннеля. Длина туннеля обозначается t , объем (площадь) резонатора - $|R|$, площадь сечения туннеля или площадь (ширина) отверстия - $|T|$. Собственные значения с порядковым номером n , операторов $-\Delta_\epsilon$ и $-\Delta_0$, обозначаются λ_n^ϵ и λ_n^0 соответственно, а их собственные функции - $\psi_n^\epsilon(x)$ и $\psi_n^0(x)$ (Здесь и в дальнейшем, через x обозначается вектор-переменная в рассматриваемом пространстве \mathbb{R}^\bullet). $\frac{\partial}{\partial n}$ - производная в направлении внешней нормали к области.

Системы описанного типа встречаются в ряде работ, в различных вариациях, как с конечным, так и с бесконечным количеством резонаторов, разными ограничениями на форму и соотношения между параметрами системы, а также вариациями в самих операторах, действующих в области. Одной из основных целей является выявление влияния подобных возмущений границы на спектр оператора, в частности, на собственные значения и собственные функции изначального оператора.

1.1.2 Результаты из теории вариационного исчисления

Влияние граничных возмущений на спектр сильно варьируется, в зависимости от типа возмущения. Например, в случае достаточно регулярных возмущений, собственные значения λ_n^ϵ оператора Ω_ϵ , при $\epsilon \rightarrow 0$, непрерывно переходят в собственные значения λ_n^0 изначального оператора. В данной секции приводятся теоремы о влиянии граничных возмущений на непрерывность собственных значений, из первого тома Методов математической физики Куранта и Гильберта [6], глава VI, §2. Теоремы в этой главе относятся к следующей задаче на собственные значения λ :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{\partial}{\partial x} u \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{\partial}{\partial y} u \right) - qu + \lambda \rho u = 0 \quad (1)$$

Здесь вводится параметрическая функция от координат $\rho(x)$, плотности массы, которая будет рассматриваться в дальнейшем, а также параметры $p > 0$, $q \geq 0$, которые в дальнейших рассмотрениях равны $p = 1$, $q = 0$. Введем следующее определение:

Определение 1.1.1. *Граница Γ'_ϵ деформируется в границу Γ сильно непрерывно, если точки границы Γ'_ϵ выражаются через точки границы Γ следующим образом:*

$$\begin{aligned}x' &= x + g(x, y); \\y' &= y + h(x, y);\end{aligned}$$

И функции $g(x, y), h(x, y)$ являются непрерывными функциями двух переменных, с кусочно-непрерывной первой производной и, вместе со своими первыми производными, не превышающие по абсолютному значению ϵ :

$$\begin{aligned}|g(x, y)| &< \epsilon \\|h(x, y)| &< \epsilon \\|g'(x, y)| &< \epsilon \\|h'(x, y)| &< \epsilon\end{aligned}\tag{2}$$

Ниже, без доказательства, приводится теорема 10 из [6].

Теорема 1.1.1. *Для любых граничных условий смешанного типа (условия Неймана или Дирихле на всех границах), собственное значение задачи (1) с порядковым номером n , изменяется непрерывным образом, если граница области изменяется сильно непрерывно.*

Таким образом, при непрерывной деформации границы, достаточным (но не необходимым) условием непрерывного изменения собственных значений Лапласиана с граничными условиями Неймана, кроме поточечной сходимости, является непрерывное изменение нормали к границе области. Теорема может быть уточнена:

Следствие 1.1.1. *Если граница области деформируется с помощью (2), при выполнении*

$$\begin{aligned}\left|\frac{\partial g}{\partial x}\right| < \epsilon, \left|\frac{\partial g}{\partial y}\right| < \epsilon, \\ \left|\frac{\partial h}{\partial x}\right| < \epsilon, \left|\frac{\partial h}{\partial y}\right| < \epsilon,\end{aligned}$$

где ϵ - произвольное малое положительное число, тогда существует число η , зависящее от ϵ и приближающееся к 0 вместе с ϵ , такое, что для любого n и любого граничного условия типа

$$A \frac{\partial u}{\partial n} + Bu = 0,$$

собственные значения μ_n, μ'_n с порядковым номером n , невозмущенной и деформированной областей соответственно, удовлетворяют соотношению:

$$\left| \frac{\mu'_n}{\mu_n} - 1 \right| < \eta$$

Далее приводится теорема 11 из [6].

Теорема 1.1.2. *Если граничное условие задачи (1) является чистым условием Дирихле*

$$u|_{\partial\Omega} = 0,$$

то при деформации (2) границы области, для непрерывности собственного значения λ_n с порядковым номером n , достаточным условием является только непрерывность функций $g(x, y)$ и $h(x, y)$.

Помимо этих теорем, в дальнейшем используется утверждение о плотности массы - теорема 7 из [6]:

Теорема 1.1.3. *Если в дифференциальном уравнении (1), коэффициент $\rho(x)$ варьируется в каждой точке в одинаковом направлении (везде увеличивается или везде уменьшается), то для любого граничного условия, каждое собственное значение λ_n задачи, с порядковым номером n , изменяется в противоположном направлении (уменьшается или увеличивается соответственно).*

Если в этом уравнении варьируется один из коэффициентов p, q , то каждое собственное значение λ_n задачи, с порядковым номером n , изменяется в том же направлении.

Таким образом, увеличив "массу" волновой функции в области, можно уменьшить энергию собственных состояний системы.

1.1.3 Обзор существующих результатов

1.1.3.1 Система с одним резонатором

Случай с возмущением границы одним прямоугольным резонатором Гельмгольца, при конечной длине прямоугольного туннеля, встречается в [6], как пример нарушения непрерывности собственных значений при деформации, имеющей слабую непрерывность при $\epsilon \rightarrow 0$ (т.е. поточечную сходимость).

Ниже описывается система, геометрия которой изображена на рисунке 2. Рассмотрим дифференциальное уравнение ((1), $\rho = 1, p = 1, q = 0$)

$$\Delta u + \lambda \rho u = 0$$

И пусть Ω - квадрат со стороной равной 1. Мы присоединяем резонатор R - второй квадрат Ω_ϵ , со стороной ϵ , ориентированный параллельно изначальному. Туннель T представляет собой узкую прямоугольную полосу с длиной ϵ и шириной δ , перпендикулярную обоим прямоугольникам. Область с деформированной границей Ω_ϵ - это объединение этих трех областей: $\Omega_\epsilon = \Omega \cup R \cup T$.

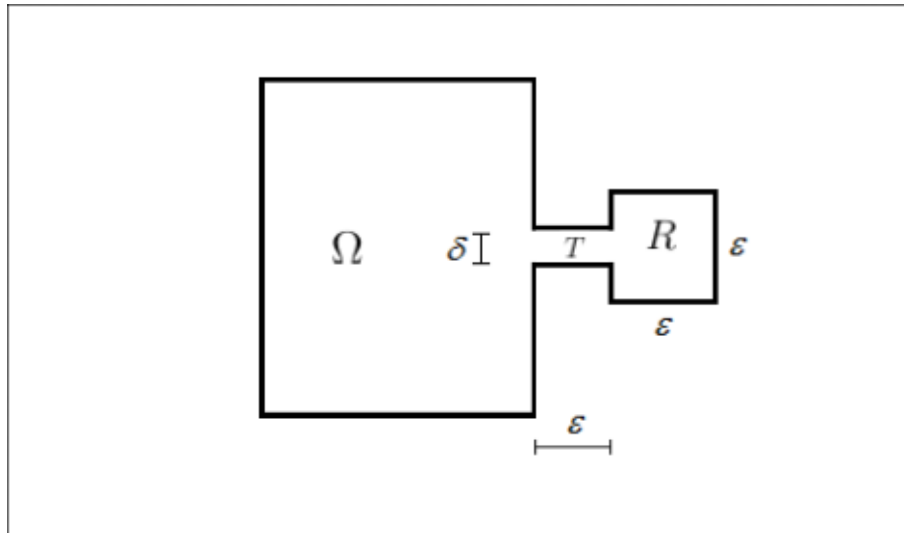


Рисунок 2 – Геометрия системы с одним присоединенным резонатором.

Накладывая граничное условие Неймана $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ на протяжении всей границы, мы получаем первое собственное значение равное нулю, чему соответ-

ствуется собственная функция равная константе:

$$\begin{aligned}\lambda_1^\epsilon &= 0 \\ \psi_1^\epsilon &= \text{const}\end{aligned}$$

Далее, если ширину туннеля δ выбрать достаточно малой, то второе собственное значение можно неограниченно приблизить к нулю. Докажем это с помощью следующей тестовой функции: пусть функция ϕ принимает в Ω и в R два константных значения, а в туннеле T линейно переходит между ними, сохраняя непрерывность:

$$\phi(x) = \begin{cases} c, & x \in \Omega \\ -\frac{1}{\epsilon}(x_0 - x_t^1)/\epsilon + c(x_t^2 - x_0)/\epsilon, & x \in T \\ -\frac{1}{\epsilon}, & x \in R \end{cases} \quad (3)$$

где x_t^1 и x_t^2 - горизонтальные координаты начала и конца туннеля.

Далее, выбираем константу c так, чтобы интеграл от ϕ по области Ω_ϵ обратился в 0. Если ϵ достаточно мала, то c сколь угодно близка к нулю.

Спектральный интеграл $(\Delta_\epsilon \phi, \phi)$ по области Ω_ϵ будет порядка $\frac{\eta}{\epsilon^3}$. Если мы выберем $\eta = \epsilon^4$, то этот интеграл сколь угодно мал, в то время как норма ϕ сколь угодно близка к единице. Таким образом, вследствие минимизирующего свойства собственных функций, второе собственное значение возмущенного оператора сколь угодно мало.

Если ϵ приближается к нулю, второе собственное значение сходится к нулю, если $\frac{\eta}{\epsilon^3} \rightarrow 0$. Но второе собственное значение исходного оператора строго положительно. Значит оно не является пределом второго собственного значения возмущенного оператора, несмотря на то что граница возмущенной области поточечно сходится к границе исходной.

1.1.3.2 Система с конечным количеством резонаторов

В данной секции приводятся результаты из статьи Х. Арриеты, Д. Хэйла, Ч.Хана, Задачи на собственные значения для негладко-возмущенных областей [7]. Эта работа рассматривает системы с одним присоединенным резонатором и

распространяет результаты на случай конечного количества резонаторов. Резонаторы и туннели имеют обобщенную форму и количество измерений рассматриваемого пространства \mathbb{R}^N , $n \geq 2$. В сущности, используемые здесь параметры системы, при переводе в термины других работ, эквивалентны пропорциям системы из [6], т.е.

$$\begin{aligned} w &\approx h \approx \epsilon \\ t &\approx \epsilon \\ \delta &= \epsilon^\eta, \eta > 3 \end{aligned}$$

Основным результатом является демонстрация поведения собственных значений и собственных функций возмущенных систем в пределе. Авторы подчеркивают тот факт, что при описании предельного спектра, существенным является не конкретные особенности формы присоединяемых областей, но их относительное изменение площади в процессе уменьшения параметра ϵ .

Опишем рассматриваемую систему с одним резонатором, изображенную на рисунке 3. Пусть Ω_0 - изначальная область, Ω_1 - присоединяемая область, не пересекающаяся с изначальной, такие что выполняются следующие условия:

$$\begin{aligned} \exists \alpha, \beta > 0 : \\ \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : |x| < \alpha, |y| < \beta\} \cap \Omega_0 &= \{(x, y) : -\alpha < x < 0, |y| < \beta\} \\ \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 < x < 2\alpha, |y| < \beta\} \cap R_1 &= \{(x, y) : \alpha < x < 2\alpha, |y| < \beta\} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\Omega_0 \cap R_1 = \emptyset.$$

Пусть также

$$T_1 \subset \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x \leq \alpha, |y| \leq \beta\}$$

- некоторое односвязное множество, такое что $\Omega_0 \cup T_1 \cup R_1$ - ограниченное, односвязное множество, с гладкой границей.

Приведенные условия описывают области Ω_0, R_1 , достаточно большие, чтобы целиком вместить туннель T_1 , отраженный относительно его левой и правой границы. (точечная линия на рисунке 3)

Далее определяется зависимость присоединенных областей от параметра ϵ . Эта зависимость определяется аналогично другим работам, и сводится к

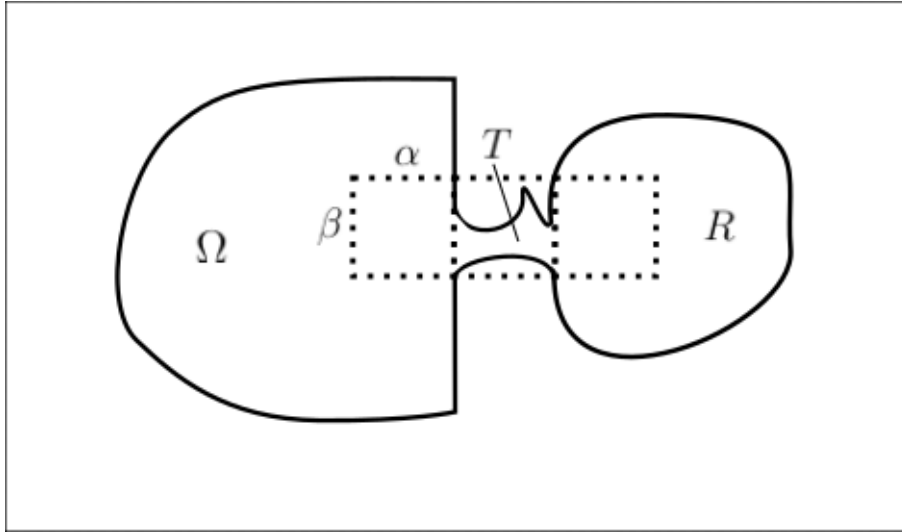


Рисунок 3 – Геометрия системы с одним резонатором и туннелем произвольной формы.

умножению на масштабирующий фактор, свой для каждой из областей T_ϵ и R_ϵ . Конкретно, Резонатор масштабируется как ϵR_1 , а туннель, как $\epsilon^\eta T_1, \eta > 0$.

В работе рассматриваются различные граничные условия. Здесь мы приведем существенные для нас результаты для граничных условий Неймана. Стоит отметить что именно при рассмотрении граничных условий Неймана, на параметр η накладываются ограничения, в частности для двумерного пространства, $\eta > 3$. Обозначим λ_k^ϵ - k -ое собственное значение для области с параметром ϵ , тогда собственные значения изначального оператора - λ_k^0 .

Итак, для случая с одним присоединенным обобщенным резонатором описанного типа в двумерном пространстве и граничными условиями Неймана, выполняются следующие теорема для второго собственного значения и второй собственной функции:

Теорема 1.1.4. Пусть $\eta > 3$ тогда:

1.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lambda_0^\epsilon = 0$$

2. Сходимость второй собственной функции в H^1 . При $\epsilon \rightarrow 0$, выполняет-

ся:

$$\psi_2^\epsilon \rightarrow 0 \quad (\text{в } H^1(\Omega_0)) \quad (5)$$

$$\|\psi_2^\epsilon\|_{H^2(T)} \rightarrow 0, \quad (6)$$

$$\|\psi_2^\epsilon\|_{L^2(R)} \rightarrow 1. \quad (7)$$

3. Сходимость второй собственной функции в H^L .

Если изначальная область сколь угодно гладкая: $\Omega_0 \subset C^\infty$, тогда для любого $L \geq 1$, при $\epsilon \rightarrow 0$, выполняется

$$\psi_2^\epsilon \rightarrow 0,$$

в смысле пространства $H^L(\Omega'_0)$, где Ω'_0 , это изначальная область, за исключением круга лежащего в Ω_0 , с центром в точке возмущения.

Таким образом второе собственное значение предельной задачи обращается в нуль, а вторая собственная функция, при достаточно гладкой границе изначальной области, обращается в нуль вместе со своими производными, всюду, за исключением окрестности точки возмущения.

Следующая теорема касается остальных собственных значений и функций:

Теорема 1.1.5. Пусть $\eta > 3$ и $m \geq 3$, тогда:

1.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lambda_m^\epsilon = \lambda_{m-1}^0$$

2. Для любой положительной последовательности $\{\epsilon_k\}_{k=1}^\infty$, сходящейся к нулю, существует подпоследовательность $\{\delta_k\}_{k=1}^\infty$ и полная система ортогональных собственных функций $\{\psi_m^0\}_{m=1}^\infty$, изначальной задачи, таких что при $k \rightarrow \infty$, выполняется:

$$\psi_m^{\delta_k} \rightarrow \psi_{m-1}^0 \quad (\text{в } H^1(\Omega_0))$$

$$\|\psi_2^{\delta_k}\|_{H^1(T \cup R)} \rightarrow 0,$$

3. Если изначальная область сколь угодно гладкая: $\Omega_0 \subset C^\infty$, тогда для любого $l \geq 1$, при $k \rightarrow \infty$, выполняется

$$\psi_m^{\delta_k} \rightarrow \psi_{m-1}^0,$$

в смысле пространства $H^l(\Omega'_0)$, где Ω'_0 , это изначальная область, за исключением круга лежащего в Ω_0 , с центром в точке возмущения.

Теперь, результат распространяется на случай конечного количества присоединенных резонаторов $r \geq 1$. Здесь, в отличие от дальнейшего, каждый резонатор уменьшается, не изменяя точку возмущения на границе изначальной области. Для граничных условий Неймана получаем следующие утверждения:

Утверждение 1.1.1.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lambda_m^\epsilon = 0, \quad 2 \leq m \leq r + 1$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lambda_m^\epsilon = \lambda_{m-r}^0, \quad m \geq r + 2$$

То есть каждый новый резонатор добавляет еще одно нулевое собственное значение. Так же ведут себя и собственные функции предельной задачи, а именно, аналогично приведенным теоремам 1.1.4, 1.1.5, соответствующие этим собственным значениям собственные функции также сходятся к нулю вместе со своими производными, при достаточной гладкости Ω_0 .

1.1.3.3 Система с бесконечным количеством резонаторов

В этой секции мы переходим к последовательности систем с неограниченно увеличивающимся количеством прикрепленных резонаторов, которые являются целью нашего исследования. В подобных системах, выбирается некоторое подмножество Γ на границе исходной области, которое будет заполняться периодически расположенными резонаторами. Размеры резонаторов и туннелей стремятся к нулю вместе с параметром ϵ . В качестве периода выбирается самый малый параметр ϵ . В результате этого процесса получается некоторое предельное множество значений (которое может включать бесконечность), к которым сходятся собственные значения возмущенных задач. В некоторых случаях это множество может совпадать с дискретным спектром некоторого дифференциального оператора, в этом случае мы будем называть этот оператор предельным.

Подобные системы были впервые разобраны в книге Е.Санчеза-Паленсии, Неоднородные среды и теория вибраций [8], в главе XII, §4. В этой работе опи-

сываются системы, изображенные на рисунке 1, с граничными условиями Неймана. Здесь присоединенные резонаторы являются квадратами со стороной ϵ , туннели имеют длину ϵ и ширину $\delta = \epsilon^4$, так же как в предыдущих двух работах.

Основными результатами являются следующие два утверждения:

Утверждение 1.1.2. *Второе собственное значение возмущенной задачи стремится к нулю при $\epsilon \rightarrow 0$, в то время как второе собственное значение исходной задачи строго больше нуля.*

$$\begin{aligned}\lambda_2^0 &> 0 \\ \lambda_2^\epsilon &\searrow 0; \epsilon \rightarrow 0\end{aligned}$$

Утверждение 1.1.3. *Каждое собственное значение исходной задачи является предельной точкой для некоторой последовательности собственных значений возмущенных задач, т.е.*

$$\lambda^0 \in \sigma(\Omega_0) \Rightarrow \exists \{\delta_i\}_{i=1}^\infty, \{j_i\}_{i=1}^\infty : \lambda_{j_i}^{\delta_i} \xrightarrow{i \rightarrow \infty} \lambda^0$$

Такое же свойство собственных значений исходной задачи мы будем наблюдать и в случае системы с отсутствующими туннелями, рассматриваемых нами.

Недавно вышедшая статья Д. Кардоне и А. Храбустовского, продолжает исследование сильно гофрированных границ и подробно рассматривает задачу, обобщая формы резонаторов, туннелей и вид зависимости параметров системы от малого параметра, а также количество измерений пространства: \mathbb{R}^n , $n \leq 2$. Здесь приводятся только результаты для \mathbb{R}^2 , необходимые для настоящей работы, но стоит заметить что результаты для высших измерений отличаются от них незначительно.

Опишем систему изображенную на рисунке 4. Как и прежде, Ω - ограниченная область в \mathbb{R}^2 , часть границы этой области, которая подвергается деформации, обозначается $\Gamma \subseteq \Omega$. Далее, $\epsilon > 0$ - малый параметр, а w, δ, t - положительные числа, стремящиеся к нулю при $\epsilon \rightarrow 0$, со следующими ограни-

чениями:

$$\begin{aligned}
 w &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 \\
 \delta &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 \\
 t &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 \\
 \delta &\leq w \leq \epsilon
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

которые гарантируют что резонаторы не пересекутся геометрически, а также ограничение на скорость уменьшения ширины туннелей при уменьшении $\epsilon \rightarrow 0$:

$$\delta \gg \exp\left(-\frac{a}{\epsilon}\right); \quad \forall a > 0$$

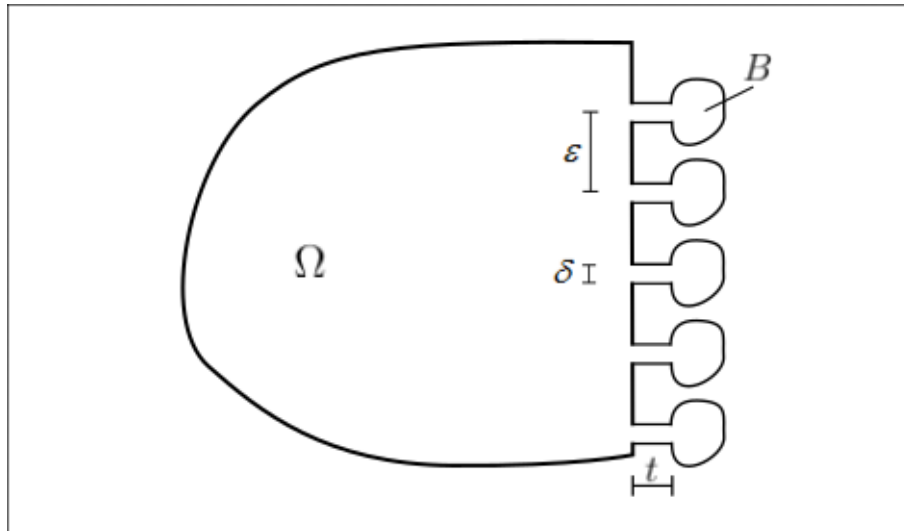


Рисунок 4 – Геометрия системы со множеством идентичных присоединенных резонаторов произвольной формы.

Множество туннелей с резонаторами прикрепляются к границе Γ , периодически, с периодом ϵ . Каждая прикрепленная область состоит из двух частей:

- Резонатор wB , где B - зафиксированная область в \mathbb{R}^2 , далее $|B|$ обозначает ее площадь,
- Туннель $\delta * t$, прямоугольник со сторонами δ, t .

Общее количество присоединенных резонаторов стремится к бесконечности и равно

$$N(\epsilon) = \frac{|\Gamma|}{\epsilon}$$

Также параметры должны удовлетворять ряду естественных условий, обеспечивающих геометрическую обособленность резонаторов, таких как ограниченность области B кубом со стороной равной единице.

Полученное объединение составляет возмущенную область Ω_ϵ . В этой области вводится оператор

$$A^\epsilon = -\frac{1}{\rho}\Delta_\epsilon.$$

Этот оператор, помимо оператора Лапласа, включает в себя дополнительно множитель ρ , значение которого зависит от координат, и который соответствует плотности массы вибраций в конкретной области.

Далее вводятся два важных предельных параметра, полностью характеризующие поведение спектра при уменьшении ϵ :

$$r := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\rho w^2 |B|}{\epsilon} \quad (9)$$

$$q := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta}{t \rho w^2 |B|} \quad (10)$$

Предполагаются следующие ограничения: $r \in [0, \infty)$ и $q \in [0, \infty]$.

Целью работы является исследование поведения спектра возмущенного оператора при предельном переходе $\epsilon \rightarrow 0$. В зависимости от параметров системы, возмущенный оператор сходится к различным задачам на собственные значения, в том числе, при некоторых значениях параметров, к исходной. Оказывается вид предельной задачи зависит только от двух независимых факторов: конечен ли предел q и равен ли нулю предел r . Четыре возможные комбинации приводят к следующим четырем предельным задачам:

1. $q < \infty$, $r > 0$. Предельный спектр является объединением точки q и спектра следующей задачи:

$$\begin{cases} -\Delta u = \lambda u, & x \in \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\lambda q r}{q - \lambda} u, & x \in \Gamma \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & x \in \partial\Omega \setminus \Gamma \end{cases} \quad (11)$$

Собственные значения этой задачи образуют две возрастающие последовательности, одна из которых неограничена, а вторая сходится к значению q .

2. $q < \infty$, $r = 0$. В этом случае предельным спектром является объединение точки q и спектра изначальной задачи для оператора $-\Delta_0$.
3. $q = \infty$, $r > 0$. Здесь, предельным является спектр следующей задачи:

$$\begin{cases} -\Delta u = \lambda u, & x \in \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial n} = \lambda r u, & x \in \Gamma \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & x \in \partial\Omega \setminus \Gamma \end{cases} \quad (12)$$

4. $q = \infty$, $r = 0$. В последнем случае спектр сходится к спектру изначальной задачи.

Далее приводится пример значений параметров системы, с помощью которых могут быть достигнуты все значения пределов q, r .

$$\begin{aligned} \delta &= \epsilon^\alpha (\alpha \geq 0), \\ w &= t = \epsilon, \\ \rho &= \epsilon^\beta (\beta \geq -1) \end{aligned} \quad (13)$$

Используя эти значения и изменяя α, β получаем все необходимые комбинации:

$$\begin{cases} r > 0; & \beta = -1, \\ r = 0; & \beta > -1. \end{cases}$$

$$\begin{cases} q > 0, & \alpha = \beta + 3, \\ q = 0, & \alpha > \beta + 3, \\ q = \infty, & \alpha < \beta + 3. \end{cases}$$

В заключении, важно заметить что постановка задачи в этой работе не предусматривает независимое изменение ширины и высоты резонаторов, так как их вид задается с помощью формы B и масштабирующего множителя w . В дальнейшем мы будем рассматривать системы с длинными резонаторами на границе (с фиксированной длиной резонаторов), которые не описываются таким образом.

1.1.4 Модель точечных отверстий: теоретическая часть

В этой секции рассматривается применение приближенной модели точечных отверстий к исследованию резонаторов Гельмгольца. Этот метод применяется в ряде работ для построения точных решений упрощенной задачи. В работе автора [2], данный метод применялся при рассмотрении резонатора прикрепленного к волноводу сбоку и посередине. Результаты включают построение вольт-амперных характеристик для указанных систем.

В настоящей работе мы применяем его к системам Ω_ϵ , строим точные собственные функции и получаем предельные функции, которые соответствуют некоторой "предельной задаче". Далее следует краткое описание метода.

Модель точечных отверстий, это распространенный метод, применяемый в случаях когда в границе области имеется отверстие, малого относительно длины волны диаметра. Метод позволяет значительно упростить геометрию системы, что во многих случаях приводит к возможности выражения модельных решений в явном виде. Метод заключается в том чтобы перейти к системе с геометрией, в которой конечные отверстия замещены на точечные, а затем, теория самосопряженных расширений симметрических операторов используется для построения параметризованного оператора, описывающего новую систему, причем параметр контролирует пропускную способность точечных отверстий и может быть подобран так, чтобы наиболее точно соответствовать ситуации с конечным диаметром отверстий.

Далее используются следующие обозначения:

- $D(A)$ - область определения оператора A ,
- $R(A)$ - множество значений оператора A ,
- $Ker(A)$ - ядро ($\{u : Au = 0\}$) оператора A ,
- $def(A, k)$ - множество дефектных элементов оператора A , отвечающих точке регулярного типа k .

Кратко опишем процесс построения модельного оператора на примере системы с одним малым отверстием, соединяющим 2 области. Пусть рассматривается две односвязных области Ω_1, Ω_2 , соединенных через малое отверстие

диаметра δ в их общей границе. Переходим к геометрии, в которой отверстие заменяется на точку x_0 в его центре. Теперь каждая из областей может рассматриваться отдельно. За Ω обозначаем их совокупность. Начнем с самосопряженного оператора H_0 , действующего как оператор Лапласа на функциях из $L^2(\Omega)$, у которых нормальная производная на границе обнуляется:

$$H_0\psi(x) = -\Delta\psi(x), \quad \frac{\partial\psi}{\partial n}|_{\partial\Omega} = 0; \quad \psi \in L^2(\Omega)$$

Теперь ограничим исходный оператор на множество функций, которые обнуляются в точке отверстия x_0 и построим его замыкание. Полученный оператор обозначим H' . Этот оператор не является самосопряженным, но только симметрическим. Его дефектные элементы (т.е. функции $f \in R(H' - k^2)^\perp$ ортогональные множеству значений оператора $H' - k^2$) можно найти используя выражение из классической теории операторов

$$Ker(A^*)^\perp = R(A),$$

получаем выражение для множества дефектных элементов H' :

$$def(H', k) = Ker(H'^* - k^2) = Ker(\Delta + k^2).$$

Искомые элементами являются функции Грина, с особенностью в точке отверстия, и их количество равно количеству непересекающихся областей в задаче:

$$\{f_{def}\} = \begin{pmatrix} G_1(x, x_0, k) \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ G_2(x, x_0, k) \end{pmatrix},$$

где $G_i(x, x_0, k)$ - функция Грина Неймановского Лапласиана в области Ω_i . Функции Грина дают равные дефектные числа $(2, 2)$, и, следовательно, оператор H' может быть расширен до самосопряженного.

Отметим что множество точек регулярного типа для рассматриваемого оператора включает в себя отрицательную полуось действительных чисел. Этот факт позволяет применить теорему Неймана теории Линейных операторов [32], для выражения элементов из области определения сопряженного оператора H'^* , через элементы из области определения его расширения по Фридрихсу, Δ^F , и его дефектные элементы, соответствующие точке регулярного типа на действительной оси:

$$D(H'^*) = D(\Delta^F) \oplus def(H', k_0), \quad k_0^2 < 0.$$

Таким образом, в каждой из обособленных областей, функция из области определения сопряженного оператора H'^* имеет следующий вид:

$$\psi(x) = a_i G_i(x, x_0, k_0^2) + b_i + o(|x - x_0|), \quad x \in \Omega_i$$

Далее, для построения самосопряженного расширения симметрического оператора H' , необходимо ограничить область определения его сопряженного H'^* , так, чтобы выполнялось следующее:

$$J(u, v) = (Hu, v) - (u, Hv) = 0, \quad u, v \in D(H). \quad (14)$$

Учитывая известное асимптотическое выражение для функции Грина Лапласиана вблизи особенности,

$$G_i(x, x_0, k) = \frac{1}{\pi} \ln \frac{1}{|x - x_0|} + \beta_i + o(|x - x_0|),$$

из (14), мы получаем интеграл по границе области, с исключением точки отверстия:

$$J(u, v) = \lim_{r \rightarrow 0} \sum_{i=0}^2 \int_{\Omega_i \setminus B^r} (-\Delta u \bar{v} + u \overline{\Delta v}) dV,$$

где B^r - окружность радиуса r с центром в точке отверстия, $B^r = \{x : |x - x^0| < r\}$.

Применяем формулу Грина,

$$J(u, v) = \sum_j \int_{\partial B_j^r} \left(-\frac{\partial u}{\partial n} \bar{v} + u \frac{\partial \bar{v}}{\partial n} \right) dS,$$

откуда, используя асимптотическое выражение функций Грина, получаем:

$$(H'^* u, v) - (u, H'^* v) = \sum_i a_i^u \bar{C}_i^v - \bar{a}_i^v C_i^u + a_i^u \bar{C}_i^v - \bar{a}_i^v C_i^u,$$

где $C_i = \left[u(x) - \frac{a_i}{\pi} \ln |x - x_0| \right]_{x \rightarrow x_0}$ - значение функции в точке отверстия, за вычетом особенности, причем "размер" этой особенности определяет пропускную способность отверстия.

У данного уравнения существует несколько решений. Из них выберем то, которое лучше всего соответствует физическому смыслу, а именно, сохраним

поток через отверстие, приравняв значения функции без особенности с обеих сторон от отверстия. Получаем выражение для функций из области определения искомого самосопряженного оператора, описывающего систему:

Утверждение 1.1.4. *Систему модели точечных отверстий с описанной выше геометрией, представляет следующий оператор:*

$$Hu = -\Delta u,$$

$$\forall u \in D(H) :$$

$$u(x) = \hat{u}_i(x) + a_i G_i(x, x_0, k_0^2), \quad x \in \Omega_i \quad (15)$$

$$a_1 = -a_2,$$

$$\hat{u}_1(x_0) = \hat{u}_2(x_0),$$

В заключении отметим что построенный оператор параметризован действительным числом $k_0^2 < 0$. Этот параметр определяет пропускную способность отверстия, что математически выражается как размер особенности, который мы сокращаем в точке отверстия, используя условие $a_1 = -a_2$. Как было показано [16], этот параметр наиболее соответствует конечному диаметру настоящего отверстия δ , если он выбирается равным

$$k_0 = \frac{2i}{\delta} \exp -\gamma, \quad (16)$$

где участвует константа Эйлера $\gamma = 0.577$.

1.1.5 Модель точечных отверстий: гофрированная граница

В данной секции приводятся результаты для систем с неограниченно-возрастающим количеством резонаторов, полученные с применением метода, в работе И.Ю.Попова, И.В.Блиновой, А.И.Попова, Модель границы, состоящей из резонаторов Гельмгольца [10]. Настоящая работа продолжает исследование подобных систем без туннелей, с использованием метода точечных отверстий.

В данной работе рассматривается двухмерная система, приведенная на рисунке 5, в которой в качестве основной области Ω_0 принимается квадрат со

стороной длины 1, вдоль всех границ которого, через малые отверстия присоединяются малые резонаторы квадратной формы, со стороной ϵ , с периодом ϵ . Туннели отсутствуют.

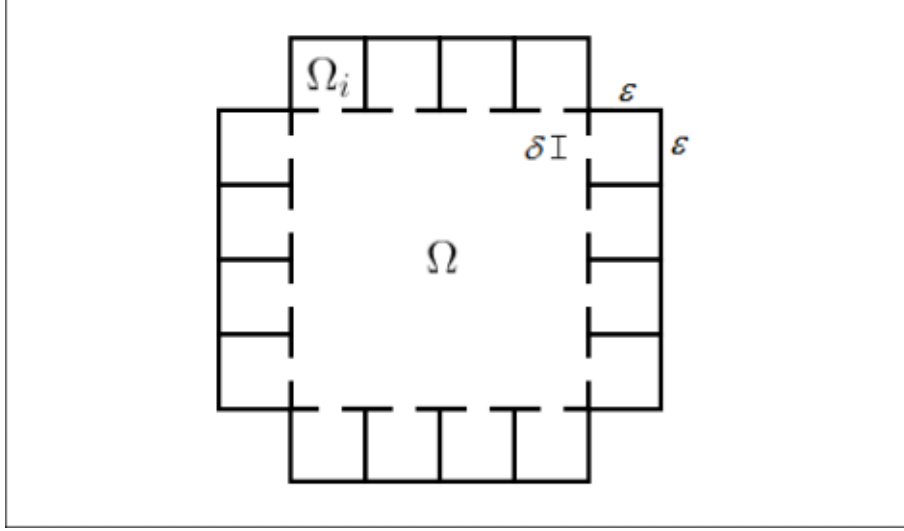


Рисунок 5 – Пример геометрии системы с гофрированной границей

К этой системе применяется модель точечных отверстий. Количество присоединенных резонаторов равно $4N$, $N = \lfloor \frac{1}{\epsilon} \rfloor$. Отсюда дефектные индексы ограниченного оператора H' равны $(8N + 2, 8N + 2)$. Дальнейшее построение аналогично предыдущей секции. В результате, получается следующее выражение для функций из области определения основного оператора (здесь и далее i проходит по всем $4N$ номерам резонаторов):

$$\begin{pmatrix} u \\ u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{u}_1 \\ \vdots \\ \tilde{u}_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n a_i^{ex} G(x, x_i, k_0) \\ a_1^{in} G_i(x, x_1, k_0) \\ \vdots \\ a_n^{in} G_i(x, x_n, k_0) \end{pmatrix} \quad (17)$$

Теперь построим в явном виде собственные функции для модельных операторов H_ϵ . Учитывая область определения оператора, общий вид для собственной функции из области определения модельного оператора, соответствующей собственному значению k^2 , имеет вид:

$$u_n(x) = \begin{cases} \sum_{j=1}^n \alpha_j^{ex} G(x, x_j, k) & x \in \Omega \\ \alpha_i^{in} G_i(x, x_i, k) & x \in \Omega_i \end{cases}$$

Для того чтобы применить ограничения на коэффициенты из (15), для каждой точки отверстия необходимо выделить особенности:

$$u_n(x) = \begin{cases} \alpha_l^{ex} G(x, x_l, k_0) + \alpha_l^{ex} g(x, x_l, k, k_0) + \sum_{j \neq l}^n \alpha_j^{ex} G(x, x_j, k) & x \in \Omega \\ \alpha_l^{in} G_l(x, x_l, k_0) + \alpha_l^{in} g_l(x, x_l, k, k_0) & x \in \Omega_l \\ \alpha_j^{in} G_j(x, x_j, k) & x \in \Omega_{j \neq l} \end{cases} \quad (18)$$

Здесь и далее, g обозначает функцию Грина, с удаленной особенностью:

$$g_{\bullet}(x, z, k, k_0) = G_{\bullet}(x, z, k) - G_{\bullet}(x, z, k_0)$$

Применяя ограничения (15) к общему виду собственной функции, получаем:

$$\alpha_i := \alpha_i^{ex} = -\alpha_i^{in} \\ \alpha_i g_i(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G(x_i, x_j, k) = -\alpha_i \hat{g}(k, k_0) \quad (19)$$

Второе выражение сочетает в себе все ограничения и представляет собой систему из $4N$ уравнений. Эта система в пределе $N \rightarrow \infty$ перейдет в интегральное уравнение, эквивалентное некоторой задаче на собственные значения, с энергозависящем граничным условием типа Робена. Условия такого типа рассматриваются, например, в [33]. Вывод интегрального уравнения более подробно будет приведен в секции результатов настоящей работы. Предполагаем что размер отверстий δ коррелирует с параметром ϵ таким образом, чтобы для некоторой функции $r(x)$, выполнялось:

$$(g_i^{in}(x, x_i, k, k_0) + g^{ex}(x, x_i, k, k_0)) = \frac{1}{r(x_i)k^2\epsilon} \quad (20)$$

В заключении, приводим основную теорему [10]:

Теорема 1.1.6. *Для описанной выше последовательности операторов H_{ϵ} , при $N \rightarrow \infty$, собственные функции сходятся к функциям, определяемым следующим интегральным уравнением,*

$$u(x) = - \int_{\Gamma} u(x_i) G^{ex}(x, x_i, k) [(g_i^{in}(x, x_i, k, k_0) + g^{ex}(x, x_i, k, k_0))]^{-1} dx,$$

которое, при (20), эквивалентно следующей задаче:

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} |_{\partial\Omega} = k^2 r u |_{\partial\Omega} \end{cases}$$

1.1.6 Граница из полос

Переходим к основным результатам настоящей главы. Первая из рассматриваемых нами систем, изображенная на рисунке 6, представляет собой квадратную область со стороной 1 в качестве исходной области Ω_0 , левая граница области подвергается возмущению, т. е. $\partial\Omega_0 \supset \Gamma = \{(x_1, x_2) : x_1 = 0, x_2 \in [0, 1]\}$. Мы не используем плотность массы, т.е. $\rho(x) = 1$. Основным оператором - Лапласианом с граничными условиями Неймана H_0 . Возмущение происходит резонаторами Гельмгольца Ω_i , присоединенными к левой границе через малые отверстия x_i , без туннелей (Здесь и далее счетчик i пробегает все N номеров резонаторов). Параметр ϵ , как и прежде соответствует периоду, в данном случае - расстоянию между соседними отверстиями. Их количество N увеличивается неограниченно, при этом их размеры изменяются как $w = const, h = \epsilon$, а размер отверстия уменьшается как $\delta = \epsilon^m$, где различные значения $m > 1$ - будут рассматриваться позже. Операторы Лапласа с граничными условиями Неймана на областях с N резонаторами будем обозначать H^N или H_ϵ , а предельный оператор - H^{lim} .

Для исследования системы, мы переходим к модели точечных отверстий, аналогично [10]. Нашей целью является исследовать предельный переход $\epsilon \rightarrow 0$ ($N \rightarrow \infty$), рассмотрев предельную задачу, к собственным функциям которой сходятся собственные функции возмущенных систем. В результате мы получаем предельную задачу на собственные значения дифференциального оператора в области Ω_0 , с граничным условием Неймана на невозмущенных границах и энерго-зависящим условием Робена на Γ , выраженное в явном виде.

Также мы применяем численные методы для построения собственных функций реальных систем (с конечным диаметром отверстия), подтверждая аналитические выводы и демонстрируя скорость сходимости к собственным функциям предельной задачи при увеличении количества резонаторов N .

Введем также следующие обозначения: $G(x, x_i, k), G_i(x, x_i, k)$ - функции

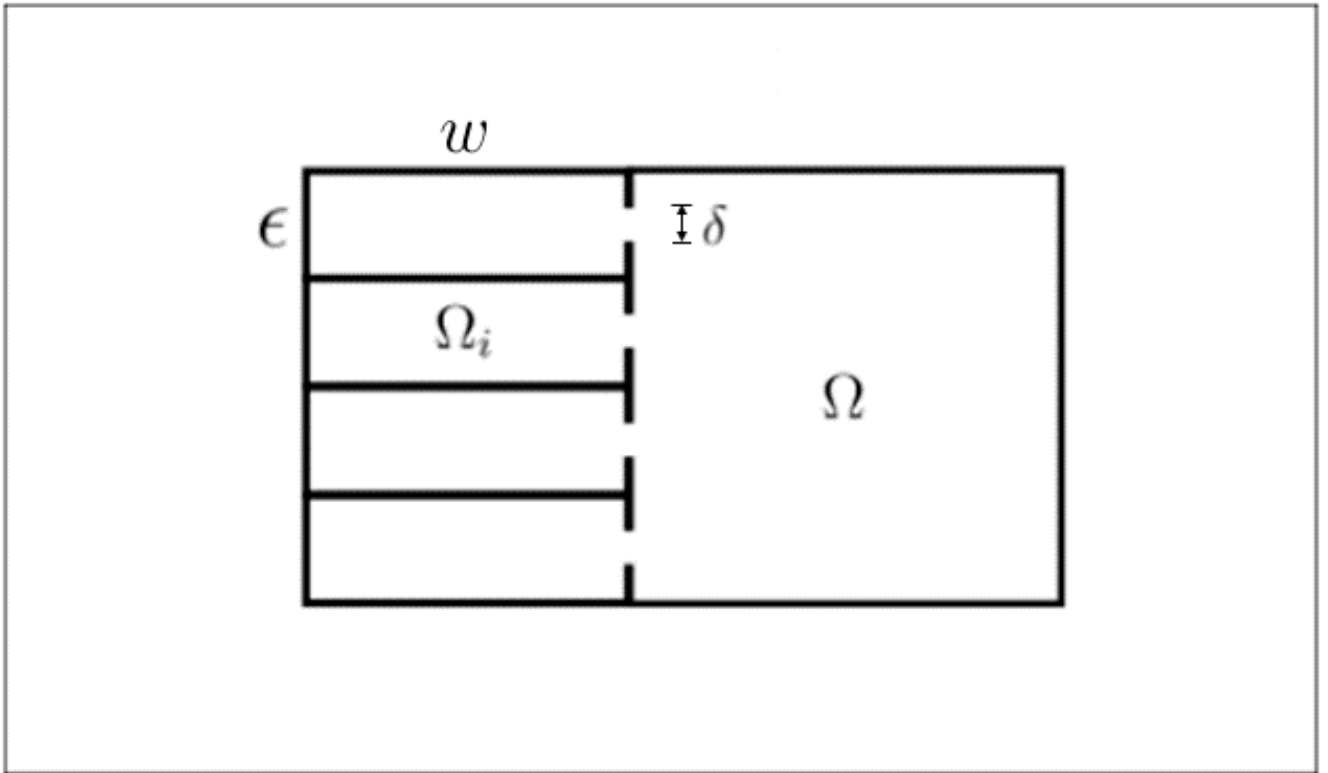


Рисунок 6 – Пример геометрии системы с гофрированной границей

Грина с условиями Неймана в прямоугольнике, для областей Ω_0 и Ω_i соответственно, с особенностью в точке отверстия x_i , а также $g(x_i, k, k_0)$, $g_i(x_i, k, k_0)$ - функции Грина в точках отверстий, с удаленными особенностями, в тех же областях.

$$g_{\bullet}(x_i, k, k_0) = [G_{\bullet}(x, x_i, k) - G_{\bullet}(x, x_i, k_0)]_{x \rightarrow x_i}$$

Внутри резонаторов одинаковые условия, поэтому $g_i(x_i, k, k_0)$ фактически зависит только от двух последних параметров и будет записываться как $\hat{g}(k, k_0)$.

Приведем основной аналитический результат секции:

Теорема 1.1.7. Пусть $\psi_n^N(x)$, $n = 1, 2, \dots$ - собственные функции возмущенного модельного оператора H^N , из семейства описанного выше.

1. Функции $\psi_n^N(x)$ имеют следующий вид:

$$\psi_n^N(x) = \begin{cases} \sum_{j=1}^N \alpha_j G(x, x_j, k) & x \in \Omega \\ -\alpha_i G_i(x, x_i, k) & x \in \Omega_i \end{cases} \quad (21)$$

где коэффициенты удовлетворяют следующей системе из N условий:

$$\alpha_i g(x_i, k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G(x_i, x_j, k) = -\alpha_i \hat{g}(k, k_0), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (22)$$

2. В пределе $N \rightarrow \infty$, функции $\psi_n^N(x)$ сходятся к решениям следующего интегрального уравнения:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= - \int_{\Gamma} \psi(y) G(x, y, k) [\hat{g}(k, k_0) dy]^{-1} dy = \\ &= - \int_{\Gamma} \psi(y) G(x, y, k) k \tan[kw] dy, \end{aligned} \quad (23)$$

которое соответствует следующей задаче на собственные значения дифференциального оператора:

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma} = -k \tan(kw) u|_{\Gamma} \\ \frac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega_0 \setminus \Gamma} = 0 \end{cases} \quad (24)$$

Остаток секции посвящен доказательству теоремы.

Сначала опишем оператор модели точечных отверстий (подробнее процедура описана в сек.1.1.4).

Произведем построение для некоторого фиксированного N (результат распространяется на все N). Пусть H' - замыкание Лапласиана Неймана, действующего в области Ω^N , на функции обнуляющиеся в точках отверстий. По теореме Неймана, область определения оператора H'^* представима в виде:

$$D(A^*) = D(-\Delta^F) \oplus def(H', k_0)$$

И дефектные элементы - это $2N$ элементов вида

$$f_{def} = \begin{pmatrix} G^\bullet(x, x_i, k) \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

где функция Грина действует в одном из регионов, по отношению к одной из связанных с ним точек отверстий, а во всех остальных регионах дефектный элемент равен нулю.

Также обозначим функции из области определения расширения Неймановского Лапласиана по Фридрихсу ($D(-\Delta')$), через \tilde{u}_\bullet (функции действуют в регионе Ω_\bullet).

Таким образом, функции из области определения оператора H'^* имеют следующий общий вид:

$$\begin{pmatrix} u \\ u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{u}_1 \\ \vdots \\ \tilde{u}_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n a_i^{ex} G(x, x_i, k_0) \\ a_1^{in} G_i(x, x_1, k_0) \\ \vdots \\ a_n^{in} G_i(x, x_n, k_0) \end{pmatrix} \quad (25)$$

Параметр расширения k_0 выбираем в соответствии с (16) равным $k_0 = \frac{2i}{\delta} \exp -\gamma$, где $\gamma = 0.577$.

Теперь чтобы получить самосопряженный оператор \hat{H} , описывающий модельную систему, мы ограничиваем $D(H')$ так, чтобы обнулялась граничная форма

$$J(u, v) = (H'^*u, v) - (u, H'^*v), \quad u, v \in D(H'^*).$$

Эти функции имеют особенности в точках отверстий, поэтому мы используем предельный переход:

$$J(u, v) = \sum_j \int_{\partial B_j^\delta} \left(-\frac{\partial u}{\partial n} \bar{v} + u \frac{\partial v}{\partial n} \right) dS,$$

где B_j^r - это круг с радиусом r вокруг отверстия x_j : $B_j^r = \{x : |x - x_j| < r\}$.

Используя формулу Грина, (25), и граничные условия Неймана, получаем:

$$J(u, v) = \sum_j \int_{\partial B_j^\delta} \left(-\frac{\partial u}{\partial n} \bar{v} + u \frac{\partial v}{\partial n} \right) dS,$$

Используем известное выражение для функции Грина Неймановского Лапласиана вблизи особенности

$$G(x, x_j, k) = \frac{1}{\pi} \ln|x - x_j| + \mathcal{O}(|x - x_j|),$$

получаем выражение для граничной формы:

$$\begin{aligned} (H'^*u, v) - (u, H'^*v) = \\ \sum_i a_i^{u,in} \overline{C_i^{v,in}} - \overline{a_i^{v,in}} C_i^{u,in} + a_i^{u,ex} \overline{C_i^{v,ex}} - \overline{a_i^{v,ex}} C_i^{u,ex} \end{aligned}$$

Здесь $C_i^{u,in/ex} = \tilde{u}^{in/ex}(x_i)$.

Выбираем расширение, которое соответствует физическому смыслу, т.е. обеспечивает сохранение потока через отверстие:

$$a_i := -a_i^{in} = a_i^{ex}, \quad (26)$$

$$C_i^{in} = C_i^{ex}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (27)$$

Стоит заметить, что первое выражение можно интерпретировать как взаимное компенсирование особенностями на разных сторонах отверстия.

Запишем условия в виде системы N уравнений:

$$\sum_{j \neq i} a_j G(x_i, x_j, k) + a_i g(x_i, k, k_0) = -a_i \hat{g}(k, k_0), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (28)$$

Первая часть теоремы доказана.

Рассмотрим предел построенных функций при $N \rightarrow \infty$. В частности выведем предельное выражение для системы условий на коэффициенты (28). С этой целью рассмотрим пределы функций Грина внутри резонаторов. Выпишем известное выражение для функций Грина уравнения Гельмгольца в прямоугольнике размеров w на h , с граничными условиями Неймана:

$$G(x, z, k) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{c_{i,j}}{wh} \frac{\cos \frac{\pi i x_1}{w} \cos \frac{\pi j x_2}{h} \cos \frac{\pi i z_1}{w} \cos \frac{\pi j z_2}{h}}{k^2 - \left(\frac{i^2 \pi^2}{w^2} + \frac{j^2 \pi^2}{h^2} \right)} \quad (29)$$

$$c_{i,j} = 2^{2-\delta_i-\delta_j}, \quad \delta_i = \begin{cases} 0, & i \neq 0 \\ 1, & i = 0 \end{cases} \quad - \text{Дельта-функция Кронекера}$$

Полагая $h = \epsilon$ и переходя к пределу $\epsilon \rightarrow \infty$, мы получаем коэффициенты для предельных условий $\left(\lambda_{i,j}^\epsilon = \frac{i^2 \pi^2}{w^2} + \frac{j^2 \pi^2}{\epsilon^2} \right)$:

$$\hat{g}_\epsilon(k, k_0) = \frac{1}{\epsilon} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{c_{i,j}}{w} \cos^2 \frac{\pi j}{2} \frac{k_0^2 - k^2}{(k^2 - \lambda_{i,j}^\epsilon)(k_0^2 - \lambda_{i,j}^\epsilon)}$$

Отмечая что $k_0^2 = -\frac{C}{\delta^2}$, мы можем выразить предел $\hat{g}^w(k) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \hat{g}_\epsilon(k, k_0)$:

$$\hat{g}^w(k) dx = \frac{1}{wk^2} + \frac{2}{w} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{(k^2 - \frac{i^2 \pi^2}{w^2})},$$

используя следующую формулу для ряда:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^2 - a^2} = \frac{1}{2a^2} - \frac{\pi \cot(a\pi)}{2a},$$

Когда расстояние между отверстиями $\epsilon \rightarrow 0$, ширина отверстий $\delta \rightarrow 0$, и учитывая $k_0 = \frac{2i}{\delta} \exp -\gamma$, $k_0^2 \rightarrow -\infty$, мы можем получить в явном виде формулы для предела:

$$\hat{g}^w(k) dx = \frac{\cot kw}{k} \quad (30)$$

Рассмотрим общую форму для собственных функций модельного оператора H^N , соответствующих собственному значению k^2 :

$$u_n(x) = \begin{cases} \sum_{j=1}^n \alpha_j^{ex} G(x, x_j, k) & x \in \Omega \\ \alpha_i^{in} G_i(x, x_i, k) & x \in \Omega_i \end{cases}$$

Отметим отличие этого выражения от общей формы элементов $D(H)$ (25), где присутствуют произвольные функции с условиями Неймана \tilde{u} и параметр k_0 зависит только от размера отверстия, но не от энергии.

Теперь чтобы соотнести a_\bullet и α_\bullet , и выразить условия (28) через $\alpha_i^{in,ex}$, мы должны выделить особенности $G_i(x, x_i, k_0)$. Для каждого отверстия l , сделаем следующее:

$$u_n(x) = \begin{cases} \alpha_l^{ex} G(x, x_l, k_0) + \alpha_l^{ex} g(x, x_l, k, k_0) + \sum_{j \neq l}^n \alpha_j^{ex} G(x, x_j, k) & x \in \Omega \\ \alpha_l^{in} G_l(x, x_l, k_0) + \alpha_l^{in} g_l(x, x_l, k, k_0) & x \in \Omega_l \\ \alpha_j^{in} G_j(x, x_j, k) & x \in \Omega_{j \neq l} \end{cases} \quad (31)$$

$$g^\bullet(x, z, k, k_0) = G^\bullet(x, z, k) - G^\bullet(x, z, k_0)$$

Сравнивая это с (25) и используя (26), мы получаем

$$\alpha_i^{ex} = a_i, \quad i = 1, \dots, N$$

и условия (28) принимают следующую форму:

$$\alpha_i := \alpha_i^{ex} = -\alpha_i^{in}$$

$$\alpha_i g_i(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G(x_i, x_j, k) = -\alpha_i \hat{g}(k, k_0) \quad (32)$$

Пусть также

$$u_i = u(x_i) = \alpha_i g_i(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G(x_i, x_j, k)$$

Условие (32) может быть представлено в виде

$$u_i = -\alpha_i \hat{g}_\epsilon(k, k_0)$$

Умножая каждое из этих N уравнений на $G(x, x_i, k)$ и суммируя, получаем

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i G(x, x_i, k) = - \sum_{i=1}^N u_i G(x, x_i, k) [\hat{g}_\epsilon(k, k_0) \epsilon]^{-1} \epsilon$$

Левая часть этого выражения - оригинальная собственная функция, а правая часть содержит значения этой функции в точках отверстий, умноженные на расстояние между ними $dx = \epsilon$, что делает выражение интегральной суммой. Наконец, рассматривая предел $N \rightarrow \infty$, мы получаем интегральное уравнение для некоторой функции $u(x)$, действующей в области Ω .

$$\begin{aligned} \psi(x) &= - \int_{\Gamma} \psi(y) G(x, y, k) [\hat{g}(k, k_0) dy]^{-1} dy = \\ &= - \int_{\Gamma} \psi(y) G(x, y, k) k \tan[kw] dy, \end{aligned} \quad (33)$$

Это интегральное уравнение эквивалентно следующей задаче на собственные значения с граничными условиями в области Ω_0 :

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} |_{\Gamma} = -k \tan(kw) u |_{\Gamma} \\ \frac{\partial u}{\partial n} |_{\partial \Omega \setminus \Gamma} = 0 \end{cases}$$

Теорема доказана.

Отметим в заключении, что область состоящая из полос, по сути приближается к области в которой оператор Лапласа заменяется на другой оператор:

$$L^{(1)} u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

однако помимо этого функция теперь может иметь разрывы в направлении оси Y , а непрерывность должна сохраняться у правой границы области. Вопрос о строгом описании оператора и функционального пространства в области полос остается открытым.

1.1.7 Граница из полос: Численные результаты

В данной секции описываются полученные численные результаты для системы с границей, гофрированной полосами. Использовалась система Mathematica.

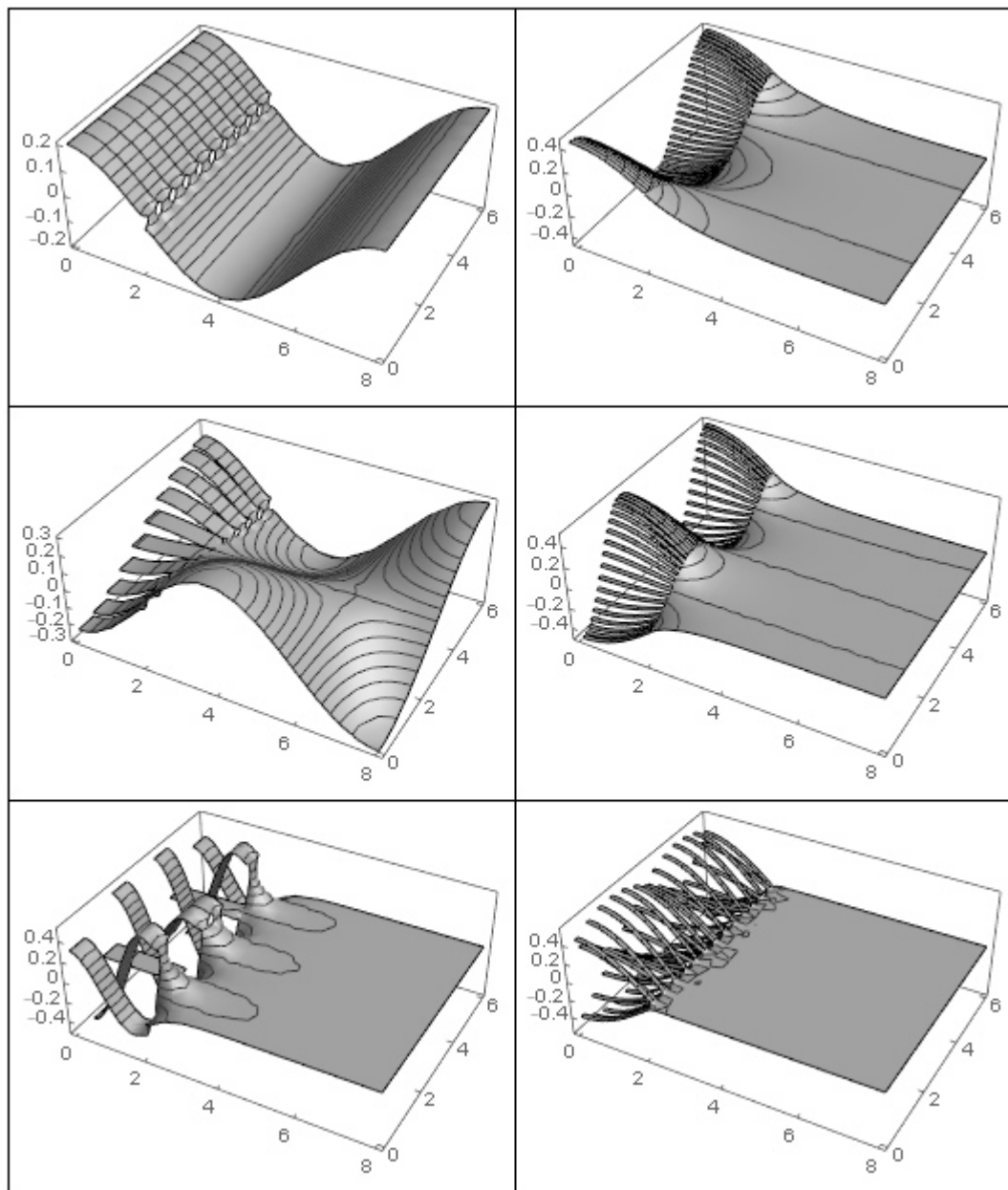


Рисунок 7 – Примеры численно построенных собственных функций оператора с гофрированной границей из полос. Слева - $N = 10$, справа - $N = 50$. Энергия увеличивается от верхней строчки до нижней, в каждом столбце (приведены не последовательные собственные функции). Размер отверстия $\delta = 0.5\epsilon$.

Были построены собственные функции систем с точной геометрией (т.е. без приближения точечных отверстий). Примеры трехмерных графиков полу-

ченных собственных функций приведены на рисунке 7. На нем приведены результаты для двух систем, с количеством полос равным десяти и пятидесяти. Номера функций выбирались так чтобы показать основные особенности построенных функций, энергии увеличиваются в каждом столбце отдельно (сверху вниз).

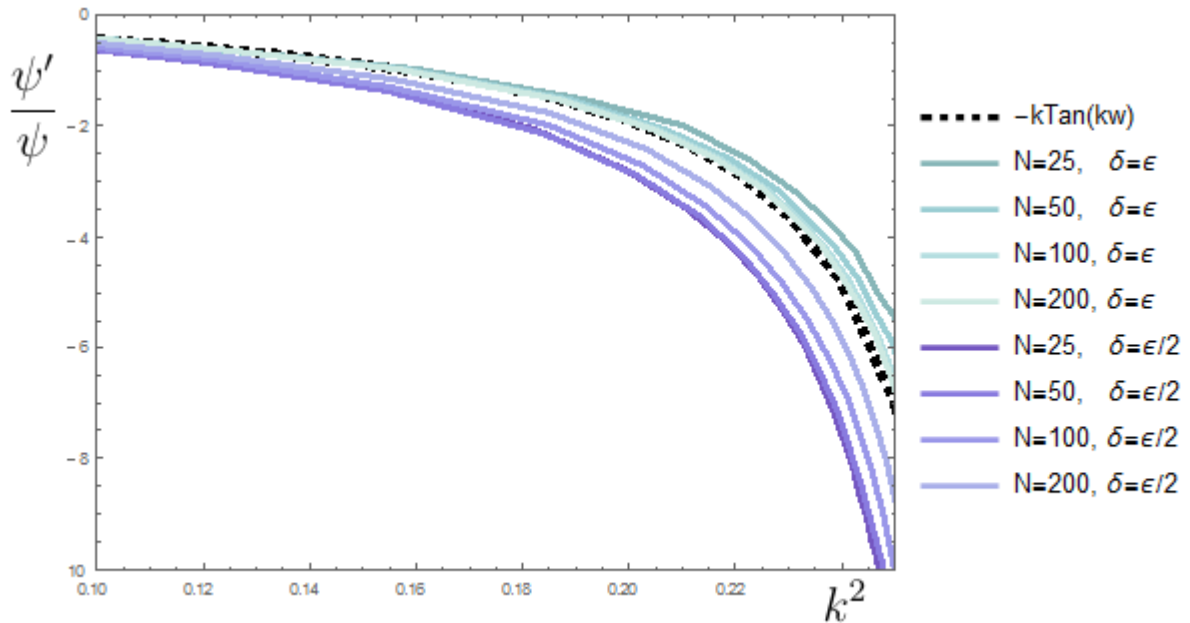


Рисунок 8 – Система с границей, гофрированной полосами. Графики отношения производной функции к ее значению, взятым вдоль возмущенной границы области Ω (среднее значение). Каждая линия соответствует фиксированной геометрии системы, с обозначенными параметрами N и δ (остальные параметры неизменны). Показаны два набора из четырех линий: для отверстий равных половине ширины полос и для отверстий равных ширине полос (т.е. при полностью отсутствующей стенке резонатора). Также приведена пунктирная линия, соответствующая теоретическому пределу, $-k \tan kw$.

Далее приводятся два графика, 8 и 9, на которых построено отношение производной собственной функции, к ее значению, как функция от собственной энергии состояния. Каждое значение получается следующим образом: отношение рассчитывается в N точках $x_i + dx$, и берется среднее арифметическое (с отбрасыванием 10% экстремальных значений). Величина dx мала по сравнению с величиной отверстий, не изменяется, и выбрана так, чтобы минимизировать разницу между собственной функцией построенной из функций Грина (см. ле-

вую часть (28)) и численным значением функции. Все параметры системы неизменны, за исключением количества резонаторов и размера отверстия.

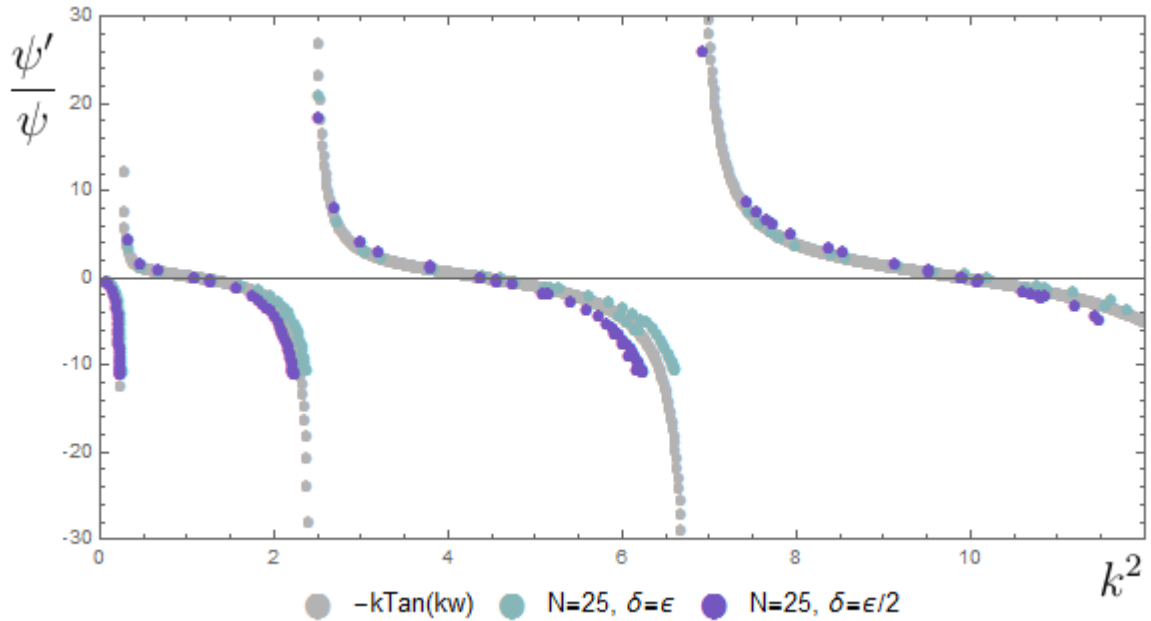


Рисунок 9 – Система с границей, гофрированной полосами. Графики отношения производной функции к ее значению, взятым вдоль возмущенной границы области Ω (среднее значение). Результат частично повторяет рисунок 8, но в другом масштабе. Каждая точка соответствует конкретной собственной функции, точки одного цвета - одинаковая геометрия системы, с обозначенными параметрами N и δ (остальные параметры неизменны). Показаны три набора точек: серые точки - теоретический предел, $-k \tan kw$, остальные два - для отверстий равных половине ширины полос и для отверстий равных ширине полос.

Мы использовали модель точечных отверстий, поэтому наш результат применим к случаю с малым отверстием в стенке резонатора. На графике помимо этого случая приведены также результаты для случая с полностью отсутствующей стенкой Ω , претерпевающей возмущение, т.е. полосы напрямую прикрепляются к основному резонатору. Как видно в масштабе рисунка 8, в случае отсутствующей стены сходимость к предельному значению $-k \tan kw$ оказывается заметно лучше. Более того, данная закономерность распространяется на все размеры отверстий, т.е. сходимость тем лучше, чем ближе δ/ϵ к единице.

На втором графике, рисунок 9, показано поведение отношения при боль-

ших значениях энергии, только для случая $N = 25$. Последнее ограничение связано со сложностью получения значений, с достаточно большим отношением на границе, при большем количестве полос, т.к. рост этого отношения замедляется. Например для систем с $N = 200$, показанных на рисунке 8, отношение ψ'/ψ первых 120 собственных функций не превышает значения 0.3.

1.1.8 Асимптотики для границы из квадратных резонаторов и численные расчеты

В данной секции приводятся результаты полученные Е.С.Трифановой в еще не опубликованной статье "Energy-dependent boundary condition as a limit of very corrugated boundary: asymptotic approach" в которой для исследования гофрированной границы применяется метод сопоставления асимптотик около отверстий. Также приводятся результаты автора, где для этой системы был применен метод точечных отверстий и с применением численных методов построены графики, соответствующие аналитическим результатам.

Основная цель - получить главные члены асимптотик $\lambda_0 - \lambda_\epsilon$, где $\lambda_0 = \frac{2\pi^2}{d^2}$ - первое собственное значение основной области.

Опишем система исследуемую в работе.

- H_0 - Лапласиан Неймана.
- Ω_0 - квадрат со стороной d . Верхняя сторона подвергается возмущению, т.е. $\Gamma = \{(x, y) : x \in [0, d], y = d\}$. Функции принадлежащие Ω_0 , помечены знаком '-'.
Туннели отсутствуют. Функции принадлежащие резонаторам помечены знаком '+'.
Функции принадлежащие резонаторам помечены знаком '+'.
- Размер отверстия получаем из соотношения:

$$\epsilon = |x_i - x_{i-1}| = m\delta^\theta = \frac{d}{N}, \quad \theta \in (0, 1). \quad (34)$$

Вкратце приведем расчеты и основной результат. В расчетах используются функции Грина уравнения Гельмгольца с граничными условиями Неймана

в прямоугольниках $G(X, X_i, k)$, точные значения которых были приведены в секции 1.1.6.

Здесь, помимо малого параметра ϵ , характеризующего размеры резонаторов и отверстий, мы рассматриваем энергии, близкие к первому собственному значению резонатора Ω_0 , т.е. разность $\left(k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2}\right)$ мала, что будет использовано в асимптотиках.

Аналогично [23], можно представить главные члены асимптотик по δ собственных функций возмущенной задачи в следующей форме:

$$\psi(X) = \begin{cases} \left(k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2}\right) \alpha_i G_i^+(X, (x_i, 0), k), & X \in \Omega^+ \setminus S((x_i, 0), r(\delta)); \\ v_0^i(x/\delta) + v_1^i(x/\delta) \ln^{-1} \delta + o(\ln^{-1} \delta), & X \in S((x_1, 0), 2r(\delta)); \\ - \left(k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2}\right) \sum_{j=1}^N \alpha_j G^-(X, (x_j, 0), k), & X \in \Omega^- \setminus S((x_i, 0), r(\delta)), \end{cases} \quad (35)$$

где $S(X, r)$ - сфера с центром X и радиусом r . Радиус $r(\delta)$ выбран так, чтобы

$$\delta d < r(\delta) < 2r(\delta) < \epsilon/2.$$

Асимптотическое разложение отклонения энергии от собственного значения резонатора выбирается в соответствии со следующей формулой:

$$k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2} = \tau_1 \ln^{-1} \delta + o(\ln^{-2} \delta). \quad (36)$$

Коэффициент τ будет определяться ниже.

Используя асимптотики функций Грина для малых резонаторов

$$\begin{aligned} G_N^+((x, 0), (x_i, 0), k) &= \\ &= -\frac{1}{\pi} \ln \delta + \frac{4N^2 \cos(N\pi x_i/d) \cos(N\pi x/d)}{d^2 (k^2 - 2N^2\pi^2/d^2)} + g_1^+(X) - \frac{1}{\pi} \ln |\xi| = \\ &= -\frac{1}{\pi} \ln \delta + \frac{4 \cos(\pi x_i/\epsilon) \cos(\pi x/\epsilon)}{k^2 \epsilon^2 - 2\pi^2} + g_1^+(X) - \frac{1}{\pi} \ln |\xi|, \end{aligned} \quad (37)$$

где $X = (x, y)$, $\xi = \frac{x}{\delta}$, $g_1^+(X)$ - ограниченная функция. Второе слагаемое - ограниченная функция при малых ϵ , поэтому мы присоединяем его к $g_1^+(X)$ и называем полученную ограниченную функцию g^+ . Далее, получаем следующее асимптотическое разложение для (35), внутри резонаторов:

Лемма 1.1.1. *Первые члены разложения решения (35) в резонаторе i имеет вид:*

$$\begin{aligned} \psi^+(x, 0) &= \alpha_i \left(k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2} \right) \left[-\frac{1}{\pi} \ln \delta + g^+(X) - \frac{1}{\pi} \ln \xi \right] \\ &= -\frac{1}{\pi} \alpha_i \tau_1 + o(1), \end{aligned} \quad (38)$$

где $x \rightarrow x_i$, $\delta \rightarrow 0$.

Аналогично получаем асимптотики решения в главном резонаторе:

Лемма 1.1.2. *Асимптотики решения (35) в главном резонаторе, вблизи отверстия i , имеет следующую форму:*

$$\begin{aligned} \psi^-(X) &= \\ &= -\alpha_i \left[-\frac{\tau_1}{\pi} + \frac{4}{d^2} \cos^2(\pi x_i/d) \right] - \\ &= \sum_{j=1, j \neq i}^N \alpha_j \left[\frac{4}{d^2} \cos(\pi x_i/d) \cos(\pi x_j/d) - \frac{\theta \tau_1}{\pi} + \right] + o(1). \end{aligned} \quad (39)$$

Теперь мы готовы сопоставить полученные асимптотики вблизи отверстий. Мы опустим эту процедуру, которая включает в себя решение системы из N уравнений, для получения коэффициентов α_i решения (35). В результате процедуры получаем следующее выражение для решения внутри главного резонатора:

$$\psi^-(x) = \frac{d}{2}(2 - \theta) \left(k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2} \right) \sum_{i=1}^N G^-((x, 0), (x_i, 0), k) (\psi^-(x_i) + o(1)) \cdot \frac{d}{N} \quad (40)$$

Это выражение является интегральной суммой. Выполняя предельный переход $N \rightarrow \infty$, получаем:

Лемма 1.1.3. *Собственные функции предельной задачи удовлетворяют следующему интегральному уравнению:*

$$\psi^-(X) = \frac{d}{2}(2 - \theta) \left(k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2} \right) \int_{\Gamma} G^-(X, X', k) \psi^-(X') dX'. \quad (41)$$

Это эквивалентно некоторой краевой задаче, что формулируется в основной теореме:

Теорема 1.1.8. *Собственные функции Лапласиана, соответствующие собственному значению, близкому к $\frac{2\pi^2}{d^2}$, для систем с гофрированной границей описанных выше, при $N \rightarrow \infty$, сходятся к собственным функциям задачи со следующим условием на верхней границе:*

$$\frac{\partial \psi}{\partial n} \Big|_{\partial \Omega} = \frac{d}{2}(2 - \theta) \left(k^2 - \frac{2\pi^2}{d^2} \right) \psi \Big|_{\partial \Omega}. \quad (42)$$

В данном результате, первое собственное значение главного резонатора рассматривалось только для простоты. Результат напрямую обобщается на случай любого собственного значения.

В заключение приводим численные результаты соответствующие этим аналитическим выкладкам. Для модельных задач при фиксированных N были получены численные решения. С применением модели точечных отверстий, аналитически получаем результаты аналогичные сек.1.1.5. Приведем условие на коэффициенты α_i перед функциями Грина для модельной задачи:

$$\alpha_i g_i(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G(x_i, x_j, k) = -\alpha_i \hat{g}(k, k_0)$$

В этом уравнении, для сравнения с численными расчетами для конечных отверстий, полагаем

$$\alpha_i g_i(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G(x_i, x_j, k) \approx \psi_{k^2}(x_i),$$

для значений функций в точках, а для производных этих функций, полагаем:

$$\alpha_i \approx \frac{\partial \psi_{k^2}}{\partial n}(x_i)$$

С учетом этих приближений, мы можем сравнить численно полученное значение $\frac{\partial \psi_{k^2}}{\partial n} / \psi_{k^2}(x_i)$, с его аналитическим аналогом $g_i(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \frac{\alpha_j}{\alpha_i} G(x_i, x_j, k)$.

На рисунке 10 изображены графики зависимости $\frac{\partial \psi_{k^2}}{\partial n} / \psi_{k^2}(x_i)$ в среднем по всей границе с резонаторами, для модельных задач с фиксированными $N =$

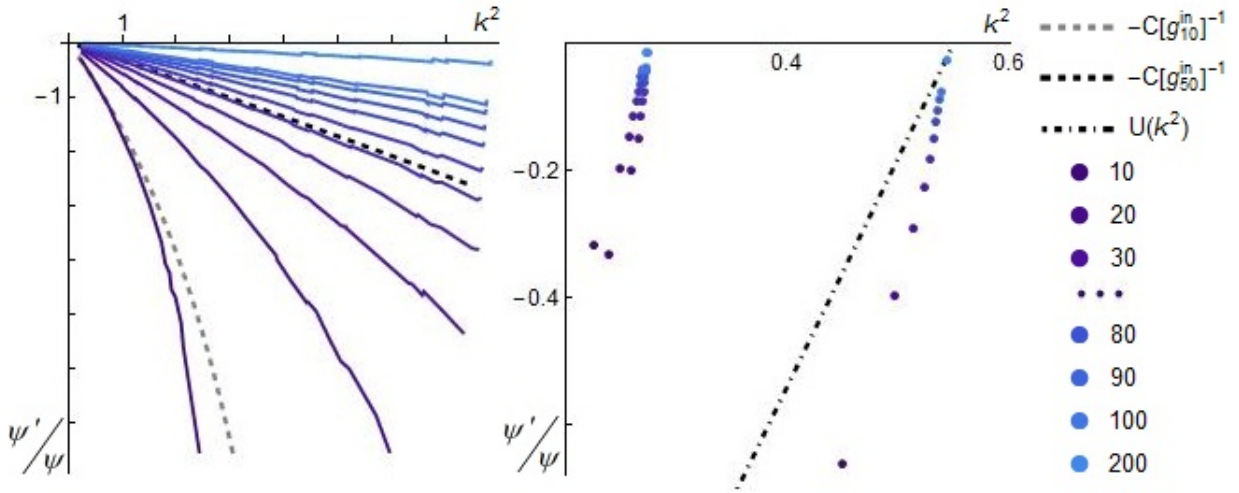


Рисунок 10 – Слева – отношение производной функции к значению, в зависимости от энергии состояния. Разные графики соответствуют системам с разным N . Справа – тот же график в другом масштабе, но точки не соединены (горизонтальными) линиями. Пунктиром указаны аналитически полученные функции.

10, 20, ...90, 100, 200 (во всех случаях среднее квадратическое отклонение $\sigma \ll 1$), т.е. каждая точка – одно из численно найденных связанных состояний с фиксированным N и k^2 . Использован параметр $\theta = 0.8$. На левом графике пунктиром показана теоретически полученная функция $-C[\hat{g}(k, k_0)]^{-1}$, умноженная на константу C , значение которой определяется методом взятия производной на границе: для представленных графиков, производная берется на малом расстоянии от стенки, в точке напротив каждого отверстия. Таким образом, показано, что для модельных собственных функций, $\frac{\partial \psi_{k^2}}{\partial n}(x_i + \vec{n}\xi)/\alpha_i$, при малых ξ не зависит от i и энергии k^2 . Для улучшения сходимости $G(x, x_i, k)$ при численных расчетах, можно использовать формулу из [31]. На правом графике пунктиром показана функция $\frac{\epsilon}{2}(2 - \theta)[k^2 - \lambda]$, точки к которым сходятся последовательности – собственные значения большого резонатора. Полученные значения, при возрастании N , сходятся к теоретически полученной функции $U(k^2)$, см. (42). Также, видно, что парные значения, сходящиеся к $\lambda < 0.4$, с увеличением N разворачиваются параллельно $U(k^2)$.

1.2 Полупрозрачный гофрированный барьер

Переходим к следующей задаче - системам с полупрозрачными барьерами. Эти системы рассматриваются в данной секции, и далее, в следующей главе, где барьер моделируется с использованием сингулярного δ -потенциала.

Сначала рассмотрим применение методов асимптотических разложений секции 1.1.8 к системе с малым отверстием в полупрозрачном барьере, а затем применим разработанные методы работы с гофрированной границей, чтобы построить гофрированный барьер.

1.2.1 Асимптотики для полупрозрачного барьера с малым отверстием

В данном параграфе приводятся результаты нашей статьи [1]. Рассматривается квантовый волновод с полупрозрачным барьером, расположенным поперек него (см. рисунок 11). Предполагается, что барьер имеет небольшое окно. Это локальное возмущение волновода приводит к появлению резонансных состояний, локализованных вблизи барьера с окном. Получена асимптотика (по малому параметру - ширине окна) резонансов (квази-связанных состояний). Описана процедура построения полного формального асимптотического разложения, первые два члена получены в явном виде. Эти члены описывают смещение резонанса от порога и время жизни соответствующего резонансного состояния.

Система из двух волноводов с общей полупрозрачной стенкой была исследована в [34]. Мы рассмотрим аналогичную систему, но с полупрозрачным барьером, расположенным поперек волновода.

Зададим вводные формулы. α - параметр прозрачности. $\alpha = 0$ означает отсутствие барьера, $\alpha = \infty$ - непрозрачный барьер. Граничные условия на обеих стенках волновода являются условиями Дирихле. Но для барьера существуют особые условия:

$$\begin{cases} u_+ = u_- \\ u'_+ - u'_- = \alpha u \end{cases} . \quad (43)$$

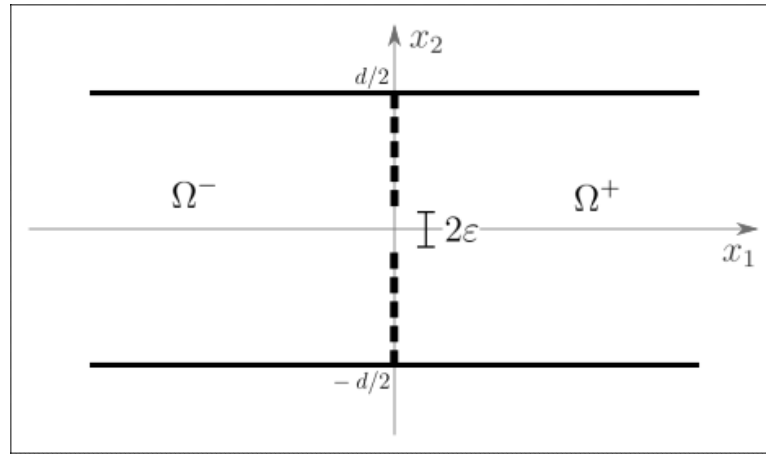


Рисунок 11 – Волновод с полупрозрачной границей, посередине которой малое отверстие.

Второе условие характеризует "скачок" производной на барьере, α - вещественная константа. Условия такого типа появляются, если рассматривается сингулярный потенциал, поддерживаемый на гиперповерхности. Такие потенциалы интенсивно исследовались в течение последних двух десятилетий (см., например, [35, 36, 37, 38, 39]).

Размер окна равен 2ε , окно располагается в центре барьера. Для соответствующей невозмущенной системы (т.е. без окна), можно провести разделение переменных. Собственные значения и ортонормальные собственные функции для Лапласиана (т.е. второй производной), в сечении волновода, следующие:

$$\psi_n(x_2) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{\pi n x_2}{d}, \quad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{d} \right)^2.$$

Эти собственные значения играют роль порогов для соответствующих ветвей непрерывного спектра волноводного Гамильтониана. Нижняя граница непрерывного спектра Лапласиана Дирихле больше нуля. Мы ищем главные члены асимптотического разложения квази-собственных значений вблизи первого порога:

$$\sqrt{\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 - \tau_\varepsilon^2} = \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{i=0}^{[j/2]-1} \tau_{ji} \varepsilon^j \left(\ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right)^i. \quad (44)$$

Это не единственное возможное расширение, но оно удобно в данном случае. Асимптотические ряды для соответствующих собственных функций имеют

следующий вид:

$$\psi_\varepsilon(x) = \sqrt{\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 - \tau_\varepsilon^2} \cdot \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j P_{j+1} \left(D_y, \ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) G^-(x, y, k) \Big|_{y=0}, \quad x \in \Omega^- \setminus S_{\varepsilon_0(\varepsilon/\varepsilon_0)^{1/2}}, \quad (45)$$

$$\psi_\varepsilon(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{i=0}^{[(j-1)/2]} v_{ji} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \varepsilon^j \ln^i \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}, \quad x \in S_{2\varepsilon_0(\varepsilon/\varepsilon_0)^{1/2}}, \quad (46)$$

$$\psi_\varepsilon(x) = -\sqrt{\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 - \tau_\varepsilon^2} \cdot \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j P_{j+1} \left(D_y, \ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) G^+(x, y, k) \Big|_{y=0}, \quad x \in \Omega^+ \setminus S_{\varepsilon_0(\varepsilon/\varepsilon_0)^{1/2}}. \quad (47)$$

Здесь ε_0 - естественная единица длины, например d , S_t это окружность радиуса t с центром в середине окна,

$$v_{ji} \in W_{2,loc}^1(\Omega^- \cup \Omega^+),$$

$$P_1 \left(D_y, \ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) = c_{10}^{(1)} \frac{\partial}{\partial n_y},$$

n_y - нормаль к барьеру в y ,

$$P_m \left(D_y, \ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) = \sum_{q=1}^{m-1} \sum_{i=0}^{[(q-1)/2]} c_{qi}^{(m)} \left(\ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) D_y^{m-q+1}, \quad m \geq 2,$$

$$D_y^{2j+1} = \frac{\partial^{2j+1}}{\partial n_y^{2j+1}}, \quad D_y^{2j} = \frac{\partial^{2j}}{\partial n_y^{2j-1} \partial l_y}.$$

Первое, что мы собираемся вычислить - функцию Грина для такой системы. Функция Грина для стандартного плоского квантового волновода хорошо известна [40], и записывается как:

$$G(x, y, k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n(x_2) \cdot \psi_n(y_2)}{2p_n} \cdot e^{-p_n \cdot |x_1 - y_1|}$$

Здесь x_1 и y_1 - координаты на оси волновода, ψ - это ортонормальные собственные функции для невозмущенного случая, $p_n = \sqrt{\lambda_n - k^2}$. Для $n = 1$ это в точности левая часть асимптотического расширения, приведенного ранее.

Рассмотрим наш случай, когда волновод расположен как на рисунке, x_0 - абсцисса барьера, а два аргумента функции Грина - это x и y . Можно записать

функцию Грина с некоторыми коэффициентами, рассматривая три подобласти:

$$G(x, y, k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n(x_2) \cdot \psi_n(y_2)}{2p_n} \cdot \phi(x_1, y_1, k),,$$

где

$$\phi(x_1, y_1, k) = \begin{cases} a_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)}, & y_1 < x_1, \\ b_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)} + c_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)}, & x_0 < x_1 < y_1, \\ d_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)}, & x_1 < x_0. \end{cases}$$

Коэффициенты рассчитываются с использованием условий (43):

$$\left\{ \begin{array}{l} a_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} = b_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} + c_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} \\ -p_n a_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} + p_n b_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} - p_n c_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} = 1 \\ b_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} + c_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} = d_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} \\ -p_n b_n \cdot e^{-p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} + p_n c_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} - p_n d_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} = \\ = \alpha \cdot d_n \cdot e^{p_n \cdot (x_1 - y_1)} \Big|_{x_1=y_1} \end{array} \right. \Leftrightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_n = b_n + c_n \\ p_n(b_n - a_n - c_n) = 1 \\ b_n \frac{1}{\gamma} + c_n \gamma = d_n \gamma \\ 2c_n p_n = d_n(\alpha + 2p_n) \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} a_n = \frac{\alpha \gamma^2 - \alpha - 2p_n}{2p_n(\alpha + 2p_n)} \\ b_n = \frac{\alpha \gamma^2}{2p_n(\alpha + 2p_n)} \\ c_n = -\frac{1}{2p_n} \\ d_n = -\frac{1}{\alpha + 2p_n} \end{array} \right.,$$

где $\gamma = e^{p_n \cdot (x_0 - y_1)}$. Заметим, что для случая без барьера, ($\alpha = 0$), мы получим коэффициенты, удовлетворяющие обычным формулам:

$$a_n = c_n = d_n = -\frac{1}{2p_n}, \quad b_n = 0.$$

Производная функции Грина используется в (45) и (47), поэтому нам необходимо следующее представление:

$$\begin{aligned} D_y^j G^\pm(x, 0, k) = & \\ = \frac{1}{d} \sin \frac{\pi x_2}{d} \sin \frac{\pi y_2}{d} D_y^j (\phi(x_1, y_1, k)) \Big|_{y_1=y_0} & \left(\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 - k^2 \right)^{-1/2} + \\ & + \Phi_j(x, k) \ln \frac{r}{\varepsilon_0} + g_j^\pm(x, k), \end{aligned}$$

где $g_j^\pm(x, k)$ не имеет сингулярности при $x = 0$.

Граничные задачи для коэффициентов v_{ji} могут быть получены следующим образом. Рассмотрим асимптотический ряд τ_ε^2 на основе (44):

$$\tau_\varepsilon^2 = \sum_p \sum_q \Lambda_{pq} \varepsilon^p \ln^q \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}, \quad (48)$$

где коэффициенты Λ_{pq} являются полиномами от τ_{ji} , которые можно легко вычислить. Затем, можно подставить (46) и (48) в уравнение Гельмгольца, изменить переменные $\xi = \frac{x}{\varepsilon}$ и сопоставить члены соответствующих порядков в обоих рядах. Таким образом, получается следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \Delta_\xi v_{ji} &= - \sum_{p=0}^{j-3} \sum_{q=0}^{[p/2]-1} \Lambda_{pq} v_{j-p-2, i-q}, \quad \xi \in R^2 \setminus \Gamma_1, \\ v_{ji} &= 0, \quad \xi \in \Gamma_1, \end{aligned} \quad (49)$$

где

$$\Gamma_1 = \{\xi | \xi_1 = 0 \wedge \xi_2 \in (-\infty; -1] \cup [1; +\infty)\}.$$

Определим оператор K_{pq} для сумм $S(x, \varepsilon)$ типа (45) и (47) следующим способом: если $S(x, \varepsilon)$ имеет коэффициент $\mu(\xi)$ для $\varepsilon^p \ln^q \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}$ в асимптотическом разложении, тогда $K_{pq}(S) = \mu$. Также определим $K_p = \sum_q K_{pq}$.

Принимая во внимание представление производной функции Грина, мы можем использовать процедуру, аналогичную той, что описана в [41], [42], и получить:

$$\lim_{k \rightarrow \frac{\pi}{d}} \left(\sqrt{\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 - k^2} P_1 G^-(x, 0, k) \right) = -\frac{\pi}{d^2} c_{10}^{(1)} \sin \frac{\pi x_2}{d},$$

$$\lim_{k \rightarrow \frac{\pi}{d}} \left(\sqrt{\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 - k^2} P_1 G^+(x, 0, k) \right) = 0,$$

$$\begin{aligned} &\varepsilon^{-1} K_1 \left(\sqrt{\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 - \tau_\varepsilon^2} \cdot P_1 G^+(x, 0, \tau_\varepsilon) \right) = \\ &= \varepsilon^{-1} c_{10}^{(1)} K_1 \left(\left(\tau_{20} \varepsilon^2 + \tau_{30} \varepsilon^3 + \tau_{40} \varepsilon^4 + \tau_{41} \varepsilon^4 \ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} + \dots \right) \cdot \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{1}{\pi} \ln \rho + g(x, 0, \tau_\varepsilon) \right) \right) = \\ &= \varepsilon^{-1} c_{10}^{(1)} \cdot \tau_{20} \cdot \frac{x_1}{\pi \rho^2} = \xi_1 \cdot c_{10}^{(1)} \cdot \tau_{20} \cdot \pi^{-1} \rho^{-2} \end{aligned}$$

Лемма 1.2.1. *Существуют гармонические функции $Y_q(\xi)$, которые имеют следующие дифференцируемые асимптотики в $\rho \rightarrow \infty$:*

$$Y_q = \begin{cases} -\sum_{j=1}^{\infty} \rho^{-j} (a_{qj}^+ \cos j\theta + b_{qj}^+ \sin j\theta), & \xi_1 > 0 \\ \rho^q (a_q^0 \cos q\theta + b_q^0 \sin q\theta) + \sum_{j=1}^{\infty} \rho^{-j} (a_{qj}^- \cos j\theta + b_{qj}^- \sin j\theta), & \xi_1 < 0 \end{cases}$$

Чтобы соответствовать членам из (49), мы можем выбрать v_{10} следующим образом:

$$v_{10}(\xi) = c_{10}^{(1)} \sum_{j=1}^{\infty} \rho^{-j} (a_{qj}^+ \cos j\theta + b_{qj}^+ \sin j\theta). \quad (50)$$

Теперь, мы можем приравнять коэффициенты $\rho^{-1} \cos \theta$ в (49) и (50), чтобы получить τ_{20} :

$$\begin{aligned} \xi_1 \cdot c_{10}^{(1)} \cdot \tau_{20} \cdot \pi^{-1} \rho^{-2} &= \rho \cos \theta \cdot c_{10}^{(1)} \cdot \tau_{20} \cdot \pi^{-1} \rho^{-2} = \rho^{-1} \cos \theta \cdot c_{10}^{(1)} \cdot \tau_{20} \cdot \pi^{-1} \Rightarrow \\ \tau_{20} \cdot \pi^{-1} &= a_{q1}^+ \Rightarrow \tau_{20} = \pi \cdot a_{q1}^+. \end{aligned}$$

Выводы Предложенная процедура может быть продолжена для получения членов асимптотического разложения любого порядка. Результаты, касающиеся действительной части резонанса, дают возможность оценить сдвиг резонанса относительно порога. Что касается последней формулы для τ_{20} , то она показывает мнимую часть резонанса, которая соответствует скорости распада для резонансного состояния, т.е. времени жизни квази-связанного состояния.

1.2.2 Барьер из полос

Все существующие результаты касались возмущению границ областей. Нашей следующей целью является распространить разработанные методы на более широкий круг геометрий систем. Рассмотрим возмущение в виде барьера из резонаторов.

Общий вид системы с гофрированным барьером представлен на рисунке 12. Расширим использованные ранее обозначения:

- Пусть Ω_L, Ω_R - две непересекающиеся области в \mathbb{R}^2 с общей границей Γ .

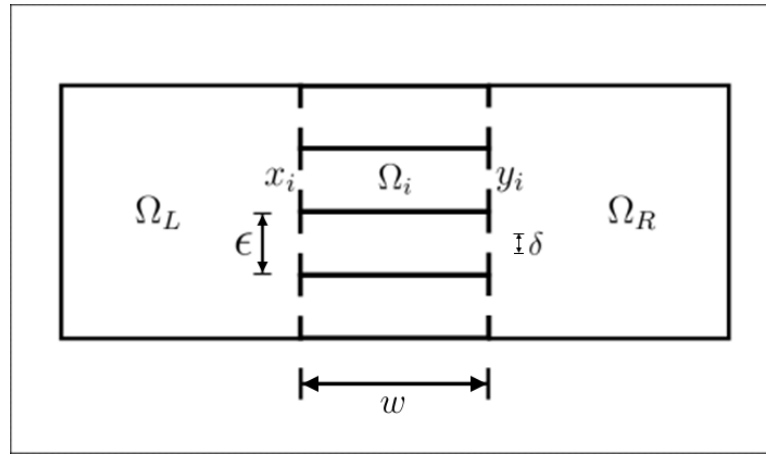


Рисунок 12 – Два квадратных резонатора, связанные через гофрированную границу из N (здесь $N = 4$) прямоугольных резонаторов, каждый из которых имеет два отверстия в точках x_i и y_i .

- Вдоль границы между основными областями вставляются N резонаторов $\Omega_i, i = 1, 2, \dots, N$ (не изменяя формы областей, но сдвигая одну из них на необходимое расстояние).
- Каждый резонатор соединяется с обеими областями через два отверстия диаметра δ . Середины отверстий обозначаются x_i , для отверстий из левой области Ω_L , и y_i - из правой Ω_R (каждая из точек - 2-вектор). (Туннели для барьеров в настоящей работе не рассматриваются)
- Резонаторы имеют прямоугольную форму, со сторонами w, h .
- Операторы действующие в областях Ω_L, Ω_R будем помечать буквами: Δ_L, Δ_R . Граница соответствующая Γ , лежащая в Ω_L после разделения - Γ_L , аналогично определяется Γ_R .
- Малый параметр $\epsilon = \frac{|\Gamma|}{N}$, соответствует расстоянию между соседними центрами отверстий вдоль границы Γ в каждой из основных областей.
- Оператор Лапласа, с граничными условиями Неймана, действующий на двух изолированных областях Ω_L, Ω_R обозначается H_0 , а операторы на областях с возмущением и примененным приближением точечных отверстий - H_ϵ или H^N .

В данной секции, аналогично предыдущим секциям, мы применим модель

точечных отверстий для выведения точных выражений собственных функций H^N и рассмотрим предел $N \rightarrow \infty$. В следующей секции приводятся численные результаты, соответствующие аналитическим. Рассматривается форма резонаторов в виде полос с фиксированной длиной:

$$w = \text{const}, h = \epsilon$$

Итак, после применения приближения точечных отверстий, мы получаем следующее выражение для функций из области определения оператора H^N :

$$\begin{pmatrix} u_L \\ u_1 \\ \vdots \\ u_n \\ u_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{u}_L \\ \tilde{u}_1 \\ \vdots \\ \tilde{u}_n \\ \tilde{u}_R \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n a_i^{ex} G^L(x, x_i, k_0) \\ a_1^{in} G_i(x, x_1, k_0) + b_1^{in} G_i(x, y_1, k_0) \\ \vdots \\ a_n^{in} G_i(x, x_n, k_0) + b_n^{in} G_i(x, y_n, k_0) \\ \sum_{i=0}^n b_i^{ex} G^R(x, y_i, k_0) \end{pmatrix} \quad (51)$$

Параметр k_0 выбирается в соответствии с (16): $k_0 = \frac{2i}{\delta} \exp -\gamma$, где $\gamma \approx 0.577$.

Лемма 1.2.2. *Граничная форма для $u, v \in D(H^{N*})$ имеет вид:*

$$\begin{aligned} (H^* u, v) - (u, H^* v) = & \\ & \sum_i a_i^{u,in} \overline{C_i^{v,in}} - \overline{a_i^{v,in}} C_i^{u,in} + a_i^{u,ex} \overline{C_i^{v,ex}} - \overline{a_i^{v,ex}} C_i^{u,ex} + \\ & \sum_i b_i^{u,in} \overline{\tilde{C}_i^{v,in}} - \overline{b_i^{v,in}} \tilde{C}_i^{u,in} + b_i^{u,ex} \overline{\tilde{C}_i^{v,ex}} - \overline{b_i^{v,ex}} \tilde{C}_i^{u,ex} \end{aligned}$$

Здесь $C_i^{u,in/ex} = \tilde{u}_L^{in/ex}(x_i)$, а $\tilde{C}_i^{u,in/ex} = \tilde{u}_R^{in/ex}(y_i)$.

Обнуляем граничную форму, выбирая расширение, которое соответствует физическому смыслу, т.е. обеспечивает сохранение потока через отверстие:

$$\begin{aligned} a_i &:= -a_i^{in} = a_i^{ex}, \\ b_i &:= -b_i^{in} = b_i^{ex}, \\ C_i^{in} &= C_i^{ex}, \\ \tilde{C}_i^{in} &= \tilde{C}_i^{ex}, \\ i &= 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (52)$$

Запишем условия в виде системы $2N$ уравнений для $i = 1, 2, \dots, N$:

$$\begin{cases} \sum_{j \neq i} a_j G^L(x_i, x_j, k) + a_i g_i^L(k, k_0) = \\ \quad -a_i g_i^{in}(k, k_0) - b_i G^{in}(x_i, y_i, k) \\ \sum_{j \neq i} b_j G^R(y_i, y_j, k) + b_i g_i^R(k, k_0) = \\ \quad -b_i g_i^{in}(k, k_0) - a_i G^{in}(y_i, x_i, k) \end{cases}, \quad (53)$$

где $g_i^\bullet(k, k_0) = [G^\bullet(x, z_i, k) - G^\bullet(x, z_i, k_0)]_{x \rightarrow z_i}$, z_i это x_i или y_i , в зависимости от стороны. Отметим что $g_i^{in}(k, k_0)$ не зависит от стороны из-за симметрии малых резонаторов, и $G^{in}(y_i, x_i, k) = G^{in}(x_i, y_i, k)$, благодаря общему свойству симметрии функций Грина. Первая часть теоремы доказана.

Далее рассматриваем предел $N \rightarrow \infty$.

Полагая $h = \epsilon$ и переходя к пределу $\epsilon \rightarrow \infty$, мы используем выражения для функций Грина (29) и получаем коэффициенты для предельных условий ($\lambda_{i,j}^\epsilon = \frac{i^2 \pi^2}{w^2} + \frac{j^2 \pi^2}{\epsilon^2}$):

$$\hat{G}_\epsilon(k) = \frac{1}{\epsilon} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{c_{i,j}}{w} (-1)^i \cos^2 \frac{\pi j}{2} \frac{1}{k^2 - \lambda_{i,j}^\epsilon}$$

$$\hat{g}_\epsilon(k, k_0) = \frac{1}{\epsilon} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{c_{i,j}}{w} \cos^2 \frac{\pi j}{2} \frac{k_0^2 - k^2}{(k^2 - \lambda_{i,j}^\epsilon)(k_0^2 - \lambda_{i,j}^\epsilon)}$$

$$c_{i,j} = 2^{2-\delta_i-\delta_j}, \quad \delta_i = \begin{cases} 0, & i \neq 0 \\ 1, & i = 0 \end{cases} \quad - \text{Дельта-функция Кронекера}$$

Выразим пределы $\hat{G}(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{G}_\epsilon(k)$, $\hat{g}(k, k_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{g}_\epsilon(k, k_0)$, для удобства в дальнейшем умножив их на бесконечно малую величину $dy = \epsilon$:

$$\hat{G}(k)dy = \frac{1}{wk^2} + \frac{2}{w} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^i}{k^2 - \frac{i^2 \pi^2}{w^2}}$$

$$\hat{g}(k, k_0)dy = \frac{k_0^2 - k^2}{wk_0^2 k^2} + \frac{2}{w} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{k_0^2 - k^2}{(k^2 - \frac{i^2 \pi^2}{w^2})(k_0^2 - \frac{i^2 \pi^2}{w^2})}$$

Приведем следующие формулы для рядов:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{(i^2 - a^2)(i^2 + b^2)} = \frac{a^2 + b^2 - a^2 b \pi \coth(b\pi) - ab^2 \pi \cot(a\pi)}{2a^2 b^2 (a^2 + b^2)}$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i^2 - a^2} = \frac{1 - a\pi \csc(a\pi)}{2a^2},$$

Используем их чтобы получить явные выражения для пределов:

$$\begin{aligned} \hat{G}(k)dy &= \frac{1}{k \sin kw} \\ \hat{g}(k, k_0)dy &= \frac{\coth pw}{p} + \frac{\cot kw}{k} \\ p &:= \sqrt{-k_0^2} \end{aligned}$$

Рассмотрим общую форму для собственных функций модельного оператора H^N , соответствующих собственному значению k^2 :

$$u_n(x) = \begin{cases} \sum_{j=1}^n \alpha_j^{ex} G(x, x_j, k) & x \in \Omega_L \\ \alpha_i^{in} G_i(x, x_i, k) + \beta_i^{in} G_i(x, y_i, k) & x \in \Omega_i \\ \sum_{j=1}^n \beta_j^{ex} G(x, y_j, k) & x \in \Omega_R \end{cases} .$$

Чтобы соотнести a_\bullet, b_\bullet и $\alpha_\bullet, \beta_\bullet$, и выразить условия (53) через $\alpha_i^{in,ex}$, мы должны выделить особенности $G_i(x, x_i, k_0)$. Для каждого отверстия l , сделаем следующее:

$$u_n(x) = \begin{cases} \alpha_l^{ex} G^L(x, x_l, k_0) + \alpha_l^{ex} g^L(x, x_l, k, k_0) + \sum_{j \neq l}^n \alpha_j^{ex} G^L(x, x_j, k) & x \in \Omega^L \\ \alpha_l^{in} G_l(x, x_l, k_0) + \alpha_l^{in} g_l(x, x_l, k, k_0) + \beta_l^{in} G_l(x, x'_l, k) & x \in \Omega_l \\ \alpha_j^{in} G_j(x, x_j, k) + \beta_j^{in} G_j(x, x'_j, k) & x \in \Omega_{j \neq l} \\ \sum_{j=1}^n \beta_j^{ex} G^R(x, x'_j, k) & x \in \Omega_R \end{cases} \quad (54)$$

$$g^\bullet(x, z, k, k_0) = G^\bullet(x, z, k) - G^\bullet(x, z, k_0)$$

Сравнивая это с (51) и используя (52), мы получаем

$$\begin{cases} \alpha_i := \alpha_i^{ex} = -\alpha_i^{in} \\ \beta_i := \beta_i^{ex} = -\beta_i^{in} \end{cases}$$

и условия (53) принимают следующую форму:

$$\begin{cases} \alpha_i g_i^L(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G^L(x_i, x_j, k) = -\alpha_i \hat{g}(k, k_0) - \beta_i \hat{G}(k) \\ \beta_i g_i^R(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \beta_j G^R(x'_i, x'_j, k) = -\beta_i \hat{g}(k, k_0) - \alpha_i \hat{G}(k) \end{cases} \quad (55)$$

Пусть также

$$u_i^L = u(x_i) = \alpha_i g_i^L(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G^L(x_i, x_j, k)$$

$$u_i^R = u(y_i) = \beta_i g_i^R(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \beta_j G^R(y_i, y_j, k)$$

Условие (55) может быть представлено в виде

$$\begin{cases} u^R + u^L = -(\beta_i + \alpha_i)(\hat{G}(k) + \hat{g}(k, k_0)) \\ u^R - u^L = (\beta_i - \alpha_i)(\hat{G}(k) - \hat{g}(k, k_0)) \end{cases}$$

Обозначим $r_+^\delta(k) := [\epsilon \hat{g}(k, k_0) + \epsilon \hat{G}(k)]^{-1}$, $r_-^\delta(k) := [\epsilon \hat{g}(k, k_0) - \epsilon \hat{G}(k)]^{-1}$, и выразим коэффициенты

$$\begin{cases} \alpha_i = [r_-^\delta(k)(u^R - u^L)/2 - r_+^\delta(k)(u^R + u^L)/2] \epsilon \\ \beta_i = -[r_-^\delta(k)(u^R - u^L)/2 + r_+^\delta(k)(u^R + u^L)/2] \epsilon \end{cases}$$

Пусть $\check{u} = (u^R - u^L)/2$, $\bar{u} = (u^R + u^L)/2$. Умножая каждое из этих $2N$ уравнений на $G^L(x, x_i, k)$ или $G^R(x, x'_i, k)$ и суммируя, получаем

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N \alpha_i G^L(x, x_i, k) = \sum_{i=1}^N G^L(x, x_i, k) [r_-^\delta(k)\check{u} - r_+^\delta(k)\bar{u}] \epsilon \\ \sum_{i=1}^N \beta_i G^R(x, x'_i, k) = \sum_{i=1}^N G^R(x, x'_i, k) [-r_-^\delta(k)\check{u} - r_+^\delta(k)\bar{u}] \epsilon \end{cases}$$

Левая часть этого выражения - оригинальная собственная функция, а правая часть содержит значения этой функции в точках отверстий, умноженные на расстояние между ними $dx = \epsilon$, что делает выражение интегральной суммой. Наконец, рассматривая предел $N \rightarrow \infty$, мы получаем интегральное уравнение

для некоторых функций $u^L(x)$, $u^R(x)$, действующих в областях Ω^L , Ω^R соответственно.

$$\begin{cases} u^L(x) = \int_{\Gamma} G^L(x, y, k) [r_-(k)\check{u} - r_+(k)\bar{u}] dy \\ u^R(x) = \int_{\Gamma} G^R(x, y, k) [-r_-(k)\check{u} - r_+(k)\bar{u}] dy \end{cases}$$

$$\begin{aligned} r_-(k) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} r_-^{\delta} = \frac{k \sin kw}{\cos kw - 1} \\ r_+(k) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} r_+^{\delta} = \frac{k \sin kw}{\cos kw + 1} \end{aligned} \quad (56)$$

Эти интегральные уравнения эквивалентны следующей задаче на собственные значения с граничными условиями:

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n^L} |_{\Gamma^L} = r_-(k)\check{u} - r_+(k)\bar{u} |_{\Gamma^L} \\ \frac{\partial u}{\partial n^R} |_{\Gamma^R} = -r_-(k)\check{u} - r_+(k)\bar{u} |_{\Gamma^R} \\ \frac{\partial u}{\partial n} |_{\partial\Omega_0 \setminus \Gamma} = 0 \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n^R} |_{\Gamma^R} + \frac{\partial u}{\partial n^L} |_{\Gamma^L} = -r_+(k)(u_R + u_L) |_{\Gamma} \\ \frac{\partial u}{\partial n^R} |_{\Gamma^R} - \frac{\partial u}{\partial n^L} |_{\Gamma^L} = -r_-(k)(u_R - u_L) |_{\Gamma} \\ \frac{\partial u}{\partial n} |_{\partial\Omega_0 \setminus \Gamma} = 0 \end{cases}$$

Сформулируем результаты этой секции в виде теоремы.

Теорема 1.2.1. Пусть $\psi_n^N(x)$, $n = 1, 2, \dots$ - собственные функции возмущенного модельного оператора H^N , из семейства описанного выше.

1. Функции $\psi_n^N(x)$ имеют следующий вид:

$$u_n(x) = \begin{cases} \sum_{j=1}^n \alpha_j G(x, x_j, k) & x \in \Omega_L \\ -\alpha_i G_i(x, x_i, k) - \beta_i G_i(x, y_i, k) & x \in \Omega_i \\ \sum_{j=1}^n \beta_j G(x, y_j, k) & x \in \Omega_R \end{cases} .$$

где коэффициенты удовлетворяют следующей системе из $2N$ условий ($i = 1, 2, \dots, N$):

$$\begin{cases} \alpha_i g_i^L(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \alpha_j G^L(x_i, x_j, k) = -\alpha_i \hat{g}(k, k_0) - \beta_i \hat{G}(k) \\ \beta_i g_i^R(k, k_0) + \sum_{j \neq i}^N \beta_j G^R(x'_i, x'_j, k) = -\beta_i \hat{g}(k, k_0) - \alpha_i \hat{G}(k) \end{cases} \quad (57)$$

2. В пределе $N \rightarrow \infty$, функции $\psi_n^N(x)$ сходятся к $\psi(x) = \begin{cases} u^L(x), x \in \Omega_L \\ u^R(x), x \in \Omega_R \end{cases}$ - решениям следующей пары интегральных уравнений (функции r^+, r^- определены в (56)):

$$\begin{cases} u^L(x) = \int_{\Gamma} G^L(x, y, k) [r_-(k)\check{u} - r_+(k)\bar{u}] dy \\ u^R(x) = \int_{\Gamma} G^R(x, y, k) [-r_-(k)\check{u} - r_+(k)\bar{u}] dy \end{cases}$$

которые соответствуют следующей задаче на собственные значения дифференциального оператора:

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n^R} |_{\Gamma^R} + \frac{\partial u}{\partial n^L} |_{\Gamma^L} = -r_+(k)(u_R + u_L) |_{\Gamma} \\ \frac{\partial u}{\partial n^R} |_{\Gamma^R} - \frac{\partial u}{\partial n^L} |_{\Gamma^L} = -r_-(k)(u_R - u_L) |_{\Gamma} \\ \frac{\partial u}{\partial n} |_{\partial\Omega_0 \setminus \Gamma} = 0 \end{cases}$$

1.2.3 Барьер из полос: Численные расчеты

В данном параграфе приводятся численные результаты для системы с гофрированным барьером из узких полос. Использовалась система Mathematica.

Примеры численно полученных собственных функций представлены на рисунке 13. Графики организованы аналогично рисунку 7 (см. описание в секции 1.1.7).

На графиках рисунка 14, изображены численно полученные данные для систем с барьером из 25ти резонаторов (полос). Также на графике серым изображена предельная функция. Как видно из рисунка, теоретически предсказанные асимптоты и нули присутствуют на численных графиках, а также, на

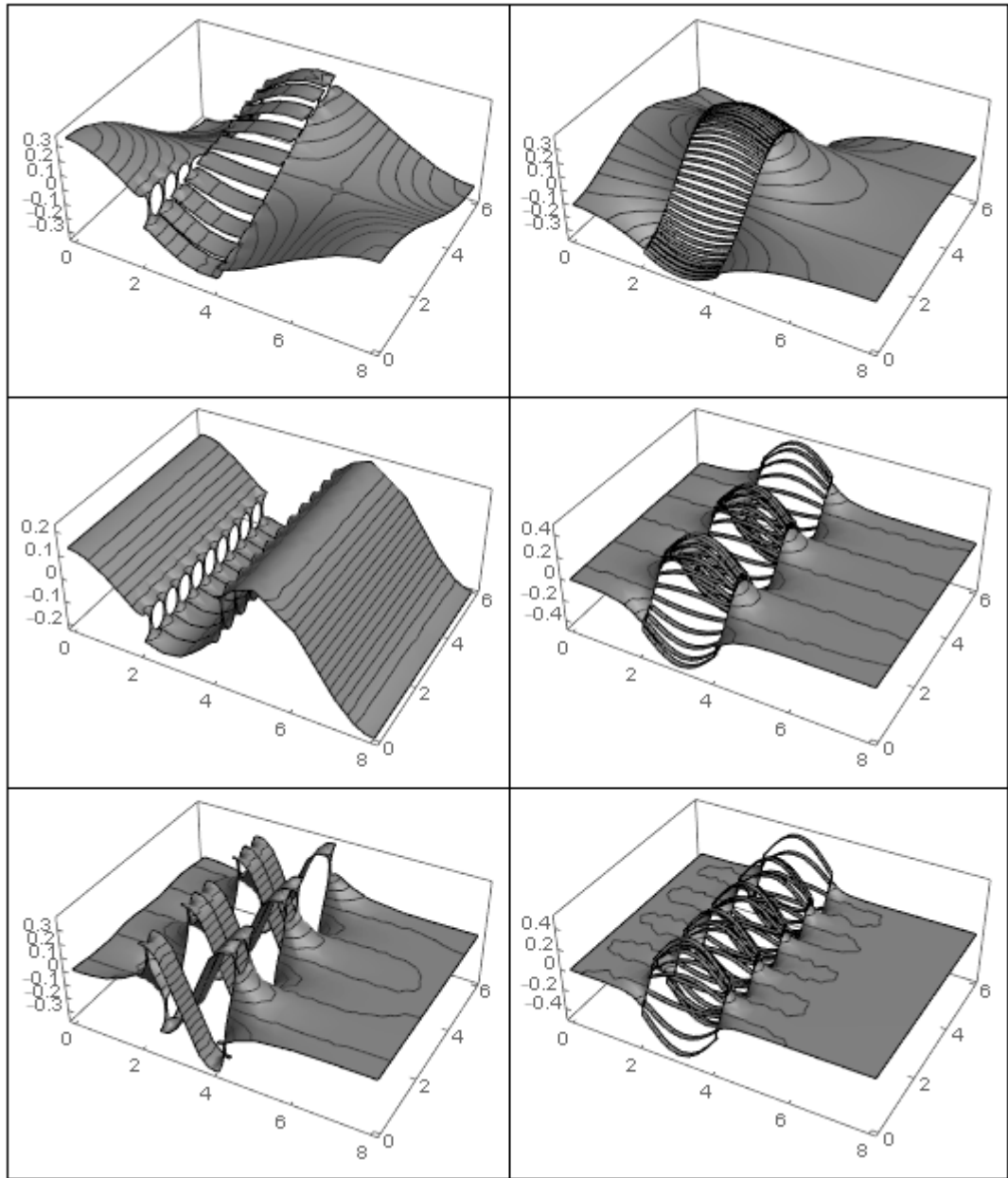


Рисунок 13 – Примеры численно построенных собственных функций оператора с гофрированным барьером из полос. Слева - $N = 10$, справа - $N = 50$. Энергия увеличивается от верхней строчки до нижней, в каждом столбце. (приведены не последовательные собственные функции). Размер отверстия $\delta = 0.1\epsilon$.

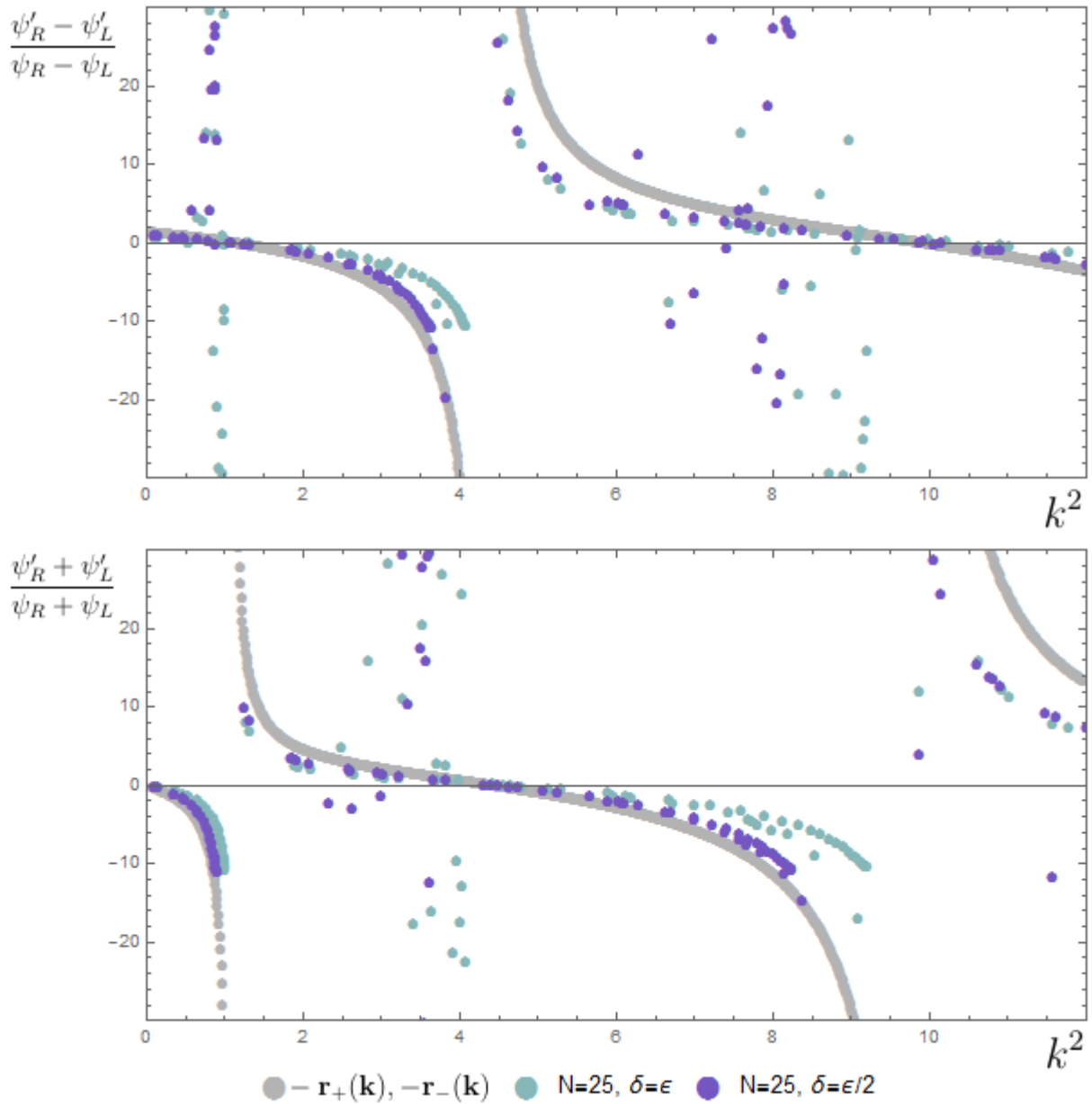


Рисунок 14 – Система с полупрозрачным барьером, гофрированным полосами. Графики отношения сумм и разностей производных функции на разных сторонах барьера, к ее значениям. Каждая точка соответствует конкретной собственной функции, точки одного цвета - одинаковая геометрия системы, с обозначенными параметрами N и δ (остальные параметры неизменны). Показаны три набора точек: серые точки - теоретический предел, $-r_-(k)$ - сверху и $-r_+(k)$ - снизу, остальные два набора - для отверстий равных ширине полос и для отверстий равных половине ширины полос.

каждом графике присутствуют области, на которых значения сильно отклоняются от теоретических. На данный момент у нас нет хорошего объяснения этого отклонения.

1.2.4 Выводы

В данной главе мы рассмотрели возмущение границы при помощи множества резонаторов Гельмгольца, присоединенных через малые отверстия. В частности, нас интересовал предел при стремлении количества резонаторов к бесконечности.

В первой части дана теоретическая база и приведены некоторые существующие результаты, которые показывают общее направление развития мысли в рамках данной темы. Во второй половине первой части приводятся результаты для разработанной нами системы с границей из полос, которые включают аналитическую часть с доказательством теоремы о предельной задаче и численную часть, поддерживающую теорию.

Во второй части предлагается новое применение концепции возмущения с помощью гофрированной границы к случаю барьера между двумя резонаторами. Для данного случая мы приводим исследование барьера из полос, с результатами аналогичными первой части.

В дальнейшем нами планируется продолжать исследование по данной теме, с включением в рассматриваемую систему коэффициента плотности массы, что позволит сделать барьер бесконечно тонким.

В следующей главе мы продолжаем исследование систем с полупрозрачными барьерами на плоскости, рассматривая сингулярный дельта-потенциал, сосредоточенный на прямой.

Глава 2. Потенциалы сосредоточенные на одномерных множествах

В данной главе рассматриваются задачи о квантовых системах, в которых потенциал сосредоточен на множестве меры нуль, по отношению к размерности основного пространства. В частности, основные результаты касаются системы с потенциалом, сосредоточенным на прямой в пространстве \mathbb{R}^3 и системы с потенциалом на двух параллельных прямых в пространстве \mathbb{R}^2 . Исследуется спектр операторов, а именно доказываются теоремы о границе непрерывного спектра и оцениваются количество точек дискретного спектра, и лагуна между непрерывным спектром и первой точкой дискретного спектра.

Большое количество исследований последних лет сосредоточены на системах с потенциалами сосредоточенными на одномерном множестве в \mathbb{R}^2 или \mathbb{R}^3 . Кроме того что задачи интересны с математической точки зрения, системы имеют важные физические интерпретации, такие как моделирование взаимодействий длинных молекул.

Существует множество работ, последовательно исследующих данную тему [47, 50, 49, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 58, 59, 60, 64, 65]. Распространенный подход к описанию таких потенциалов, основывается на теории самосопряженных расширений симметрических операторов. Аналогичная модель также была разработана для узких отверстий в поверхностях [63, 62], и для потенциалов, сосредоточенных на гиперповерхностях [48, 46, 57] (гиперповерхностями называют поверхности размерности на 1 меньше основного пространства).

В **первой секции** мы приводим краткий обзор необходимых для дальнейшего существующих результатов, в том числе:

- Метод описания операторов с сингулярными взаимодействиями, основанный на применении формулы для резольвенты, аналогичной формуле Крейна,
- Метод Бирмана-Швингера, приведенный, например, в [78], позволяющий

с помощью построения оператора определенным образом, найти верхнюю границу для количества точек дискретного спектра,

а также некоторые из систем, рассмотренных в существующих работах и соответствующие результаты.

Наш первый основной результат для данной главы приведен во **второй секции**. Система рассматриваемая в ней состоит из двух параллельных прямых на плоскости, с потенциалом переменной интенсивности, сосредоточенным на них. Эта система предлагается как модель взаимодействия длинных молекул, таких как ДНК, в ситуациях когда структура этих молекул создает различные типы взаимодействия. Частица, связанные состояния которой мы исследуем, является в этом случае возможным фактором, участвующем в процессе фиксации молекул друг относительно друга.

Третья секция посвящена системе с простой геометрией: прямая линия расположена в трехмерном пространстве, на ней сосредоточен дельта-потенциал с переменной интенсивностью. Системы данного типа являются представителем хорошо исследованного класса моделей. Они могут быть обобщены как оператор Шредингера в 3D, с сингулярным дельта-взаимодействием, сосредоточенным на подмножестве с мерой нуль, с количеством со-измерений (codimension) равным двум (то есть одномерное подмножество), и такие системы часто называют негерметичными квантовыми проводами (leaky quantum wires). Эти модели, содержащие дельта-потенциал, сосредоточенный на одномерных подмножествах, призваны приближать поведение таких квантовых систем как квантовые провода. Оператор может быть формально написан как

$$-\Delta - \alpha\delta(x - \gamma),$$

где γ соответствует линии провода. Важным свойством таких моделей является возможность туннелирования между разными частями провода, что отражает свойство моделируемых систем. Регион вне провода классически является запрещенной зоной, поэтому, для связанных состояний, вероятность найти частицу в этом регионе экспоненциально стремится к нулю и все энергии связанных состояний отрицательны. В источнике [72] можно найти полный обзор различных типов модельных графов, их сравнение и результаты.

Одна из самых важных характеристик квантовых проводов - существование и количество связанных состояний, что соответствует локализованным состояниям частиц. Для исследования спектра оператора, мы используем хорошо разработанный метод, с применением формуле подобной формуле Крейна для резольвенты возмущенного оператора, описанный в первой секции. Этот подход позволяет использовать теоремы из теории возмущений.

2.1 Обзор существующих результатов

2.1.1 Резольвента оператора с сингулярными взаимодействиями

Первым мы приводим обобщенный метод описания операторов, имеющих сингулярные взаимодействия. Этот метод применяется в большинстве приведенных ниже примеров рассмотренных систем. Метод разрабатывался на протяжении ряда статей, одни из первых появлений метода было в статьях на русском в 1977 и 1983 годах, [77, 76], где рассматривались одномерные линии в трехмерном пространстве и использовалась формула подобная резольвенте Крейна. Позже, в статье 1994 года [49], данный вопрос был рассмотрен в наиболее общем смысле, без ограничения на количество измерений основного пространства. Последующие статьи разбирающие подобные системы значительно опираются именно на вариант метода из [49]. Также, более конкретную форму метода, можно найти представленной в новой статье 2017 года [47], где рассматривается трехмерное пространство. Формула для резольвенты была вполне представлена в работе [64]. Здесь мы приводим метод в виде аналогичном этим работам.

Существует множество исследований, использующих эту процедуру для различных типов линий, [53, 56, 74, 55, 75]. Также рассматриваются случаи двумерного пространства \mathbb{R}^2 , с подпространствами со-измерения 1 [68, 69, 70], на изгибающихся линиях и циклах [51, 60], а также для линий конечной длины и различных типов сингулярных взаимодействий на линиях [52, 73, 71]. Модель окон в виде узких щелей в границе, которую можно рассматривать как

обобщение сингулярного потенциала, была предложена в [79, 16, 63, 62].

Итак, сначала мы приведем вывод формулы для резольвенты типа Крейна (см. [64]). Ограничимся случаем трехмерного пространства, т.е. основное Гильбертово пространство:

$$\mathbb{H} := L^2(\mathbb{R}^3)$$

Рассмотрим оператор Лапласа в \mathbb{H} :

$$-\Delta : D(\Delta) \rightarrow L^2,$$

определенный на функциях из пространства Соболева (т.е. функции с производными вплоть до порядка k принадлежащими L^2)

$$D(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^3).$$

Известно что $-\Delta$ на этом пространстве является самосопряженным.

Для любого параметра z принадлежащего резольвентному множеству Лапласиана $\rho(-\Delta) = \mathbb{C} \setminus [0, \infty)$, мы определяем резольвенту как ограниченный оператор:

$$R^z := (-\Delta - z)^{-1} : L^2 \rightarrow H^2.$$

Рассмотрим ограниченный оператор

$$\tau : H^2 \rightarrow X,$$

действующий на комплексное Банахово пространство X и сопряженный с ним - на двойственном пространстве X' . (Для замкнутого линейного оператора $A : X \rightarrow Y$, сопряженный оператор определен через выражение: $(A^*l)x = l(Ax)$, $\forall x \in D(A), l \in D(A^*) \subseteq Y'$).

Введем операторы:

$$R_\tau^z = \tau R^z : L^2 \rightarrow X,$$

$$\check{R}_\tau^z = R^z : X' \rightarrow L^2,$$

которые являются ограниченными.

Пусть Z - открытое подмножество $\rho(-\Delta)$, симметричное относительно Действительной оси, т.е.

$$Z = \{z : z \in \rho(-\Delta)\}, z \in Z \Rightarrow \bar{z} \in Z$$

Предположим существование для любого $z \in Z$, замкнутого оператора $Q^z : D \subseteq X' \rightarrow X$, удовлетворяющего следующим условиям:

$$Q^z - Q^w = (z - w)R_\tau^w \check{R}_\tau^w, \quad (58)$$

$$\forall l_1, l_2 \in D, l_1(Q^{\bar{z}}l_2) = \overline{l_2(Q^z l_1)}. \quad (59)$$

Эти операторы будут использованы чтобы построить семейство самосопряженных операторов, которые совпадают с $-\Delta$, будучи ограниченными на ядро τ . Семейство может быть параметризовано симметричными операторами $\Theta : D(\Theta) \subseteq X' \rightarrow X$. Определяем это семейство:

$$Q_\Theta^z = \Theta + Q^z : D(\Theta) \cap D \subseteq X' \rightarrow X, \quad (60)$$

$$Z_\Theta := \{z \in \rho(-\Delta) : (Q_\Theta^z)^{-1}, (Q_\Theta^z)^{-1} \text{ существует и ограничен}\}. \quad (61)$$

Используя эти определения, мы можем сформулировать без доказательства теорему о резольвентах операторов с сингулярными взаимодействиями:

Теорема 2.1.1. *Предположим что условия*

$$Z_\Theta \neq \emptyset$$

и

$$\text{Ran } \tau^* \cap L^2 = \{0\}$$

выполняются. Тогда ограниченный оператор

$$R_{\tau, \Theta}^z := R^z - \check{R}_\tau^z (Q_\Theta^z)^{-1} R_\tau^z, \quad z \in Z_\Theta,$$

является резольвентой самосопряженного оператора $-\Delta_{\tau, \Theta}$, определенного следующим образом:

$$D(\Delta_{\tau, \Theta}) = \{f \in L^2 : f = f_z - \check{R}_\tau^z (Q_\Theta^z)^{-1} \tau f_z, f_z \in D(\Delta)\}, \quad (62)$$

$$(-\Delta_{\tau, \Theta} - z)f := (-\Delta - z)f_z, \quad (63)$$

который совпадает с Лапласианом $-\Delta$ на множестве $\ker \tau$.

2.1.2 Сингулярные взаимодействия как обобщенные граничные условия

В настоящем параграфе приведен метод описания операторов с сингулярными взаимодействиями через обобщенные граничные условия. Этот метод крайне полезен при исследовании спектра и применяется при работе с моделью неплотных квантовых проводов [53, 54]. Мы применяем этот метод в последней секции, для описания δ -взаимодействия на прямой в трехмерном пространстве.

Метод обобщенных граничных условий позволяет работать с сингулярными взаимодействиями на линии в \mathbb{R}^3 . Линия может быть как конечной, так и бесконечной. Пусть гладкая непрерывная функция одной переменной описывает эту линию:

$$\gamma(s) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3,$$

причем она почти всюду принадлежит C^2 . Пусть Γ обозначает множество значений γ , то есть является одномерной линией в \mathbb{R}^3 , с необходимыми ограничениями на гладкость. Параметр s соответствует длине линии (со знаком), от некоторого начала координат.

Далее мы накладываем следующее условие, которое исключает возможность самопересечения:

$$\exists c = \text{const} > 0 :$$

$$\forall s_1, s_2 \in \mathbb{R},$$

$$|\gamma(s_1) - \gamma(s_2)| \geq c|s_1 - s_2| \quad (64)$$

Теперь введем репер Френе для Γ , т.е. триплет $(t(s), b(s), n(s))$, который каждой точке на кривой сопоставляет: $t(s)$ - касательный единичный вектор, сонаправленный с кривой, $b(s)$ - единичный бинормальный вектор, перпендикулярный нормали и касательному орту, и $n(s)$ - единичную главную нормаль, которая ортогональна $t(s)$ и находится в плоскости ускорения точки, если рассматривать кривую как траекторию, зависящую от времени. Классически, этот триплет существует и определен единственным образом, в тех областях, где линия имеет ненулевую кривизну $k(s) = \|\gamma''\| : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$. Мы дополнительно полагаем что на любых интервалах, где $k(s) = 0$ (т.е. когда линия

совпадает с прямой), триплет принимает некоторое фиксированное значение $(t_l(s), b_l(s), n_l(s))$, так, чтобы первый вектор был касательной, а остальные два - произвольные ортогональные вектора перпендикулярные касательной.

Таким образом, триплет $(t(s), b(s), n(s))$ состоит из кусочно-непрерывных функций, с помощью которых мы можем определить смещенную кусочно гладкую функцию:

$$\Gamma_r = \{\gamma_r(s) = \gamma(s) + \xi b(s) + \eta n(s), \quad r = (\xi^2 + \eta^2)^{1/2}, \quad \xi, \eta \in \mathbb{R}\}.$$

Исходя из (64), существует $r_0 > 0$, такой что $\Gamma_r \cap \Gamma = \emptyset$ выполняется для всех $r \leq r_0$.

Так как любая функция $f \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma)$ является непрерывной на $\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma$, ее вложение в Γ_r однозначно определено $r < r_0$. Обозначим это вложение $f_{\Gamma_r}(s)$.

Далее мы построим самосопряженный оператор соответствующий оператору Шредингера, с δ -потенциалом сосредоточенном на Γ . Обозначим его $-\Delta_{\alpha, \Gamma}$.

Теорема 2.1.2. Пусть $D(-\Delta_{\alpha, \Gamma}) : D(-\Delta_{\alpha, \Gamma}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ воздействует на функции как

$$-\Delta_{\alpha, \Gamma} f(x) = -\Delta f(x), \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \Gamma,$$

и содержит функции, удовлетворяющие следующим условиям:

1. Пределы

$$\begin{aligned} \Xi(f)(s) &= -\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{\ln r} f_{\Gamma_r}(s), \\ \Upsilon(f)(s) &= -\lim_{r \rightarrow 0} (f_{\Gamma_r}(s) + \Xi(f)(s) \ln r), \end{aligned}$$

существуют, т.е. принадлежат \mathbb{R} , не зависят от направления $\frac{1}{r}(\xi, \eta)$, и определяют функции из $L^2(\mathbb{R})$,

2. Следующее условие выполняется:

$$2\pi\alpha\Xi(f)(s) = \Upsilon(f)(s). \quad (65)$$

Тогда этот оператор описывает систему с сингулярным δ -взаимодействием на Γ .

2.1.3 Метод Бирмана-Швингера

В этом параграфе описывается метод "подсчета" собственных значений оператора, который часто используют для получения оценок размера дискретного спектра. Мы будем следовать представленной в [78] (гл. XIII, п.3-С) теореме. В настоящей работе метод применяется в последней секции главы, для нахождения верхней границы на количество связанных состояний для системы с неоднородным сингулярным взаимодействием на прямой в трехмерном пространстве.

Далее вкратце излагается суть доказательства теоремы XIII.10 из [78].

Теорема 2.1.3. Пусть оператор Шредингера $H_\lambda : H^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ является возмущением оператора $H_0 = -\Delta$, другим оператором $V \in R$ (R - класс Рольника см. [78], том 2)

$$H = H_0 + \lambda V.$$

Тогда имеет место следующее ограничение на $N(V)$ - количество связанных состояний системы:

$$N(V) \leq \frac{1}{16\pi^2} \int \frac{|V(X)||V(y)|}{|x-y|^2} d^3x d^3y$$

В частности, $N(V) < \infty$.

Доказательство. Пусть $E < 0$. Введем обозначение для собственных значений:

$$\mu_n(\lambda) = \mu_n(-\Delta + \lambda V).$$

Пусть

$$N_E(V) = \#\{n | \mu_n(1) < E\},$$

где $\#\{\bullet\}$ - кардинальное число множества.

В соответствии с леммой 1 XIII.2.C, [78], $\mu_n(\lambda)$ - монотонная и непрерывная функция параметра. Используя известный факт о спектре Лапласиана, $\mu_n(0) = 0$, получаем

$$\mu_n(1) < E \iff \exists! \lambda \in (0, 1) : \mu_n(\lambda) = E.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} N_E(V) &= \#\{n|\exists\lambda \in (0, 1) : \mu_n(\lambda) = E\} \leq \\ &\leq \sum_{\{\lambda|\mu_k(\lambda)=E;k=1,\dots,N_E(V)\}} \lambda^{-2} \leq \\ &\leq \sum_{\{\lambda|\mu_k(\lambda)=E;k=1,2,\dots\}} \lambda^{-2} \end{aligned}$$

Далее, отметим что

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda V - E)\psi &= 0 \iff \\ \iff \lambda(|V|^{1/2} (H_0 - E)^{-1} |V|^{1/2})(|V|^{1/2} \psi) &= (|V|^{1/2} \psi) \end{aligned}$$

что, в свою очередь, эквивалентно тому, что

$$\lambda \int \frac{|V(x)|^{1/2} e^{-\sqrt{-E}|x-y|} |V(y)|^{1/2}}{4\pi|x-y|} \phi(y) dy = \phi(x) \quad (66)$$

имеет нетривиальное решение $\phi \in L^2$.

Строим оператор K следующим образом:

$$K\phi = \int \frac{|V(x)|^{1/2} e^{-\sqrt{-E}|x-y|} |V(y)|^{1/2}}{4\pi|x-y|} \phi(y) dy$$

Вследствие того что $V \in R$, K - оператор Гильберта-Шмидта и самосопряженный, как следствие того что ядро действительное и симметричное.

В результате,

$$\begin{aligned} \sum_{\{\mu|\mu - \text{собственное значение } K\}} \mu^2 &= \text{Tr}(K^*K) = \\ &= \frac{1}{16\pi^2} \int e^{-2\sqrt{-E}|x-y|} \frac{|V(X)||V(y)|}{|x-y|^2} dx dy \end{aligned}$$

Далее, из выражения (66) следует:

$$\sum_{\{\lambda|\mu_k(\lambda)=E\}} \lambda^{-2} = \sum_{\{\mu|\mu - \text{собственное значение } K\}} \mu^2,$$

откуда

$$N_E(V) \leq \frac{1}{16\pi^2} \int \frac{|V(X)||V(y)|}{|x-y|^2} d^3x d^3y$$

И осталось устремить $E \nearrow 0$, чтобы охватить все связанные состояния.

□

Суть метода, использованного в доказательстве следующая:

- Используем непрерывность и монотонность собственных значений при увеличении возмущения, чтобы получить

$$N_E(V) = \#\{n | \exists \lambda \in (0, 1) : \mu_n(\lambda) = E\}$$

- Строим такой вспомогательный оператор, специфичный для контекста, чтобы он был связан с изначальным через параметр λ , который должен иметь обратную связь с собственными значениями нового оператора. Причем новый оператор должен быть оператором Гильберта-Шмидта.
- Теперь, используя норму операторов Гильберта-Шмидта, находим след, который, благодаря обратной связи с параметром λ и свойству параметра $0 < \lambda < 1$, дает верхнюю оценку на размер дискретного спектра изначального оператора.

Этот метод будет использован в третьей секции, где построенный оператор имеет совсем другой характер, но все еще связан с параметром возмущения обратной связью.

Остаток секции посвящается результатам для систем с различной геометрией, полученных с использованием описанных методов.

2.1.4 Связанные состояния искривленного провода в \mathbb{R}^2

В этом параграфе приводятся результаты статьи [51]. В ней рассматривается система в \mathbb{R}^2 , с возмущением в виде δ -взаимодействия, сосредоточенного на одномерной линии Γ . Гладкая линия Γ в данном случае приближается к прямой линии на бесконечности, но локально она отклоняется от прямой. На протяжении всей линии δ -взаимодействие имеет постоянную интенсивность.

Сначала описывается резольвента основного оператора, в соответствии с формулой, аналогичной той что приведена в этой секции (теорема 2.1.1).

$$R^k := R_0^k + \alpha R_{dx,m}^k [I - \alpha R_{m,m}^k]^{-1} R_{m,dx}^k$$

Здесь в роли пространства X выступает $L^2(\mathbb{R})$ - функции на одномерном пространстве линии, операторы $R_{m,dx}^k, R_{dx,m}^k$ - переводят и возвращают из этого пространства.

Переходя к более строгому описанию системы, приводим условие накладываемое на линию. Пусть Γ - линия в \mathbb{R}^2 , соответствующая ей функция $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ - непрерывная, кусочно- C^1 гладкая, с аргументом, отсчитывающим длину линии.

Существуют следующие ограничения на линию:

<1>

$$|\gamma(s) - \gamma(s')| \leq |s - s'|,$$

выражение, эквивалентное непрерывности.

<2>

$\exists c \in (0, 1) :$

$$|\gamma(s) - \gamma(s')| \geq c|s - s'|$$

В частности, это значит отсутствие у линии самопересечений и слишком острых углов, а также то что возможные асимптоты линии не могут быть параллельны друг другу.

<3> Γ асимптотически приближает прямую линию, в следующем смысле:

$\exists d, \mu, w \in (0, 1) :$

$$1 - \frac{|\gamma(s) - \gamma(s')|}{|s - s'|} \leq d[1 + |s + s'|^{2\mu}]^{-1/2},$$

$$\forall (s, s') \in \{(s, s') : w < \frac{s}{s'} < w^{-1}\}$$

После определения линии, строится семейство операторов

$$H_\epsilon(W, \gamma) := -\Delta + V_\epsilon$$

$$V_\epsilon(x) := \begin{cases} 0 & , x \notin \Sigma_\epsilon \\ -\frac{1}{\epsilon}W(\frac{x}{\epsilon}) & , x \in \Sigma_\epsilon \end{cases},$$

где Σ_ϵ - ϵ -окрестность прямой, $W \in L^\infty((-1, 1))$ - некоторая функция.

Данное семейство распределяет потенциал вдоль утолщенной линии, мера которой становится ненулевой. Первая теорема касается сходимости операторов с распределенным потенциалом, к искомому оператору с сингулярным потенциалом.

Теорема 2.1.4.

$$H_\epsilon(W, \Gamma) \rightarrow H_{\alpha, \gamma}, \text{ при } \epsilon \rightarrow 0,$$

где $\alpha = \int_{-1}^1 W(t)dt$, а сходимость операторов в смысле сходимости норм резольвент.

Непрерывный спектр оператора $H_{\alpha, \gamma}$ эквивалентен оператору с дельта-потенциалом на прямой:

Утверждение 2.1.1. Пусть $\alpha > 0$ и предположим что $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ - непрерывная кусочно-принадлежащая C^1 функция, удовлетворяющая условиям $\langle 1, 2, 3 \rangle$.

Тогда

$$\sigma_{ess}(H_{\alpha, \gamma}) = \left[-\frac{\alpha^2}{4}, \infty\right).$$

И основная теорема о связанном состоянии:

Теорема 2.1.5. Пусть выполняются условия предыдущего утверждения. Если неравенство $\langle 1 \rangle$ является строгим для некоторых $s, s' \in \mathbb{R}$, тогда $H_{\alpha, \gamma}$ имеет по крайней мере одно изолированное собственное значение ниже $-\frac{\alpha^2}{4}$.

2.1.5 Связанные состояния искривленного провода в \mathbb{R}^3

В этом параграфе приводятся результаты статьи [53]. Аналогично предыдущему параграфу, система содержит асимптотически приближающуюся к прямой, линию.

Сначала происходит построение резольвенты основного оператора $H_{\alpha, \gamma}$, по описанному методу (теорема 2.1.1). Здесь пространство X также пространство функций на линии $L^2(\mathbb{R})$, теперь имеющее со-измерение равное двум. Оператор $\tau : H^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ действует как

$$\tau\phi(s) := \phi(\gamma(s)).$$

Сопряженный к нему оператор $\tau^* : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow H^{-2}(\mathbb{R}^3)$ определяется через

$$(\tau^*h, w) = (h, \tau w)_l, \quad h \in L^2(\mathbb{R}), \quad w \in H^{-2}(\mathbb{R}^3),$$

и может быть формально записан как

$$\tau^*h = h\delta_\Gamma,$$

где δ_Γ - мера Дирака, на множестве Γ .

Условия на γ повторяют $\langle 1 \rangle$ и $\langle 2 \rangle$, а $\langle 3 \rangle$ заменяется на следующее:

$\langle 3' \rangle \exists \mu \geq 0, w \in (0, 1), \epsilon, d > 0 :$

$$1 - \frac{|\gamma(s) - \gamma(s')|}{|s - s'|} \leq d \frac{|s - s'|}{(|s - s'| + 1)(1 + (s^2 + s'^2)^\mu)^{1/2}},$$

$$\forall (s, s') \in \left\{ (s, s') : \begin{cases} w < \frac{s}{s'} < w^{-1}, & |s + s'| > \xi(w)\epsilon \\ |s - s'| < \epsilon, & |s + s'| < \xi(w)\epsilon \end{cases} \right\}, \xi(w) = \frac{1 + w}{1 - w}$$

Основная теорема вновь указывает на существование одного или более связанного состояния, в случае достаточного изгиба.

Теорема 2.1.6. Пусть Γ и γ удовлетворяют описанным условиям, причем μ из условия $\langle 3' \rangle : \mu > \frac{1}{2}$. Тогда оператор $-\Delta_{\gamma, \alpha}$ имеет по крайней мере одно изолированное собственное значение ниже непрерывного спектра.

2.2 Потенциал на параллельных прямых в 2D

Настоящая секция включает в себя результаты опубликованные нами в работе [44]. В данной секции мы разбираем двухмерную полосу с границами, сформированными потенциалами, сосредоточенными на параллельных прямых. Эти потенциалы напоминают полупрозрачные границы [84, 17, 67]. Потенциалы предполагаются отрицательными (т.е. притягивающими), имеющими локальное возмущение и одинаковыми с каждой стороны полосы, но имеющими сдвиг в направлении прямой, друг относительно друга. Мы доказываем существование собственного значения, вызванного локальным возмущением потенциалов и следим за его поведением с изменением сдвига потенциалов друг относительно друга.

Результат имеет биофизический характер и представляет собой модель взаимодействия длинных молекул, например при внедрении вируса в клетку или соединение двух цепей ДНК. Эти процессы могут быть поверхностно описаны следующим образом: одна молекула идентифицирует некоторую символьную последовательность на второй, приближается к этой позиции и формирует

связь. В нашей простейшей модели, молекулы представлены прямыми с потенциалами на них, а символьная последовательность из ДНК - локальные возмущения потенциалов. Возникает естественный вопрос: какие факторы влияют на сохранение близкого положения молекул при таких взаимодействиях? Если рассмотреть электрон в такой системе двух притягивающих потенциалов, благодаря локальным возмущениям существует связанное состояние для частицы. Это состояние помогает поддерживать малое расстояние между молекулами. В реальной системе такое состояние более стабильно, если существует достаточная лагуна между непрерывным и спектром и собственным значением. В нашей модели мы демонстрируем что увеличение сдвига между потенциалами приводит к уменьшению лагуны, то есть самая стабильная позиция - в случае отсутствия сдвига. Это значит что связанное состояние электрона является фактором, поддерживающим молекулы в необходимой позиции.

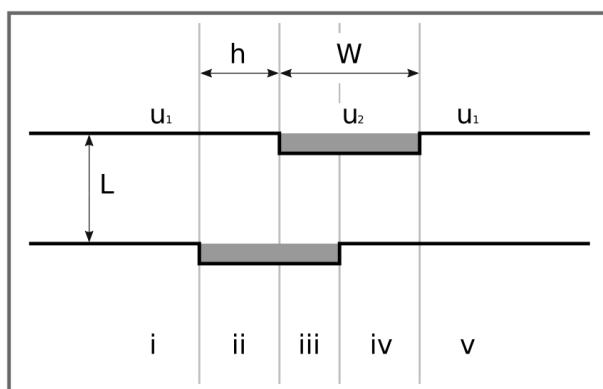


Рисунок 15 – Система из двух параллельных линий, на которых сосредоточен постоянный дельта-потенциал, с локальной вариацией интенсивности.

Рассмотрим систему показанную на рисунке 15. Она состоит из двух бесконечных параллельных прямых, на расстоянии L , на \mathbb{R}^2 . Притягивающий дельта-потенциал постоянной интенсивности $-u_1 < 0$ сосредоточен вдоль прямых, за исключением ограниченного региона длины W , на каждой прямой, на котором интенсивность меняется на другую константу $-u_2 < 0$, такую что $-u_2 < -u_1$. Обозначим $h < W$ расстояние сдвига одного региона W относительно другого. Мы используем атомную систему единиц, в которой $m = 0.5, \hbar = 1$. Отсюда Гамильтонианом системы является Лапласиан

$$\hat{H}\psi = -\Delta\psi,$$

определенный на непрерывных функциях $\psi \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R})$, которые удовлетворяют следующему условию на линиях, накладываемому дельта-потенциалом:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y}(x, y_l + 0) - \frac{\partial \psi}{\partial y}(x, y_l - 0) = -\alpha_x \psi(x, y_l) \quad (67)$$

где $y_l = 0$ или L , и $\alpha_x = u_2$ внутри возмущенного региона W на прямой, и $\alpha_x = u_1$ вне его.

2.2.1 Непрерывный спектр

Рассмотрим непрерывный спектр оператора \hat{H} . Так как всю описанную систему можно рассматривать как локальное возмущение другой системы \hat{H}_0 , у которой интенсивность потенциала не меняется на протяжении обеих прямых, непрерывный спектр совпадает с непрерывным спектром \hat{H}_0 .

$$\sigma_c(\hat{H}) = \sigma_c(\hat{H}_0)$$

Рассмотрим систему \hat{H}_0 . В данном случае можно применить метод разделения переменных. Предполагаем что волновая функция имеет вид

$$\psi(x, y) = \chi(x)\xi(y).$$

Соответственно, нижняя граница непрерывного спектра оператора \hat{H}_0 задается наименьшим собственным значением поперечной задачи, т.е. одномерного уравнения для функции $\xi(y)$. Чтобы найти его, рассмотрим оператор $-\frac{d^2}{dy^2}$ на \mathbb{R} со следующими условиями в двух точках:

$$\begin{aligned} \xi(+0) &= \xi(-0), \\ \xi(L+0) &= \xi(L-0), \\ \frac{\partial \xi}{\partial y}(+0) - \frac{\partial \xi}{\partial y}(-0) &= -\alpha \xi(-0), \\ \frac{\partial \xi}{\partial y}(L+0) - \frac{\partial \xi}{\partial y}(L-0) &= -\alpha \xi(L-0), \end{aligned} \quad (68)$$

Теорема 2.2.1. *Непрерывный спектр оператора \hat{H} имеет вид:*

$$\sigma_c(\hat{H}) = [-\max_j \kappa_j^2, \infty),$$

где κ_j - действительные корни трансцендентного уравнения

$$\frac{4}{\alpha^2} \kappa(\kappa + L) = e^{2\kappa L} - 1 \quad (69)$$

Доказательство. Дифференциальное уравнение для поперечной части \hat{H} , для собственной функции $\xi(y)$, соответствующей собственному значению k^2 имеет вид:

$$-\frac{d^2\xi}{dy^2} = k^2\xi,$$

с дополнительными условиями (68).

Возьмем общие решения $e^{\pm iky}$, и удовлетворяя условиям (68), получаем (69), где $\kappa = ik \in \mathbb{R}_-$, $k \in \text{Im}(\mathbb{C})$. \square

Собственная функция должна быть нормирована, следовательно необходимо убывание на бесконечности, т.е. $\kappa < 0$. Учитывая что функция в левой части (69) принимает минимальное значение -1 в точке $\kappa = -\frac{\alpha}{2}$, можно заключить что существует корень κ_1 уравнения (69), такой что:

$$-\alpha < \kappa_1 < -\frac{\alpha}{2}.$$

Замечание. Известно, что в случае единственной линии, нижняя граница непрерывного спектра равна $-\frac{\alpha}{2}$. В случае двух линий с условиями (68), предел границы определяемой уравнением (69), стремится к $-\alpha^2$, при $L \rightarrow 0$. Этот случай соответствует единственной линии с потенциалом -2α . Следовательно, для условий (68), получается собственное значение между значением для двух далеких одиноких линий и значением для одной линии с удвоенной интенсивностью.

2.2.2 Тестовые функции

Чтобы найти дискретный спектр, мы используем вариационный метод, рассмотрим отношение

$$E = \frac{(\hat{H}\psi, \psi)}{(\psi, \psi)},$$

минимум которого является наименьшим собственным значением оператора \hat{H} .

Если тестовая функция ψ такая что это отношение меньше чем нижняя граница непрерывного спектра, то существует как минимум одно собственное

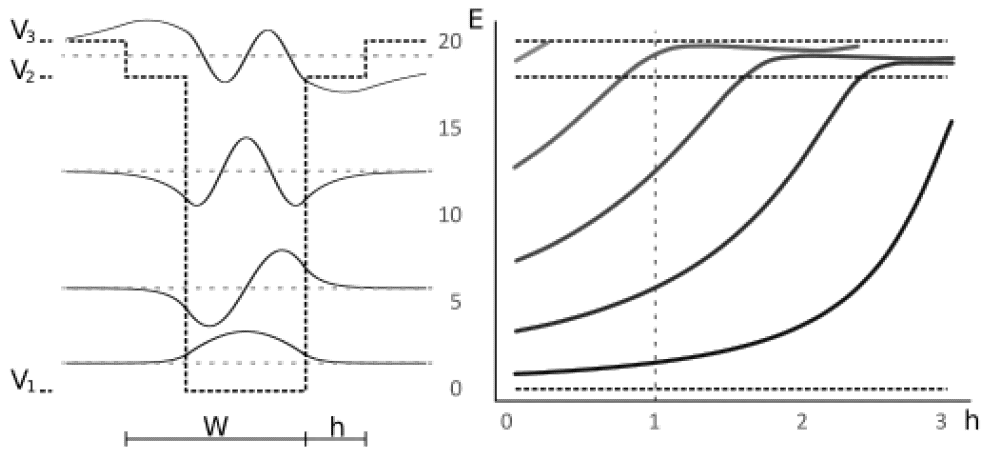


Рисунок 16 – Продольная компонента тестовой функции для $\xi_x(y)$ симметрического типа. Значения параметров: $W = 3, V_1 = 0, V_2 = 18, V_3 = 20$. Левая часть содержит изображение потенциала типа ступенчатой ямы при $h = 1$, с обозначением уровней энергии и соответствующими собственными функциями. График справа показывает зависимость уровней энергии от сдвига h .

значение оператора ниже непрерывного спектра, причем данное отношение является его верхней оценкой.

Мы построим тестовую функцию которая удовлетворяет условию (67) на прямых, но не является непрерывной функцией по оси X . Однако, она может быть приближена с произвольной точностью функциями из области определения оператора.

Конкретно, мы предполагаем что

$$\psi(x, y) = \chi(x)\xi_x(y),$$

где $\xi_x(y)$ - пять собственных функций оператора $-\frac{d^2\xi}{dy^2}$, удовлетворяющие условиям (68), одна для каждой вертикальной полосы (зоны) с уникальным сочетанием интенсивностей дельта потенциалов на прямых (эти зоны обозначены на рисунке 15 римскими цифрами).

Сначала рассмотрим поперечную часть $\xi_x(y)$. Всего есть 5 таких функций, уникальных с точностью до симметрии из них три: $(u_1, u_1), (u_1, u_2), (u_2, u_2)$. Пусть параметры α_1 и $\alpha_2, \alpha_1 \leq \alpha_2$, принимают значения u_1 или u_2 . Задача иногда именуется система с двойным дельта-потенциалом в 1D. Для $L > L_0 = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\alpha_1 \alpha_2}$, существует два решения. Если мы плавно изменим интенсивности дельта-потенциалов так, чтобы они стали равными, эти два решения трансфор-

мируются в симметрическое и асимметрическое относительно центра симметрии задачи. Мы будем называть два решения функциями симметрического и асимметрического типа, в зависимости от того в какую функцию они переходят. Ограничения на поперечную часть энергии $\tilde{E} = (0.5p)^2$, принимают следующий вид:

$$e^{-pL} = \frac{(p - a_1)(p - a_2)}{a_1 a_2}$$

Теперь разберем продольную компоненту $\chi(x)$ тестовой функции. Поперечные варианты создают пять регионов, каждый со своей энергией \tilde{E}_x . Эти уровни энергии могут быть состыкованы в ступенчатый потенциал для продольной компоненты функции. Мы рассмотрим два отдельных случая: в одном все поперечные компоненты - функции симметрического типа, в другом - асимметрического. Эти два варианта производят симметричные продольные ступенчатые потенциалы - вариацию на классический потенциал в форме квадратной ямы, в которой добавляется дополнительная ступень с каждой стороны. Мы будем называть этот потенциал ступенчатой ямой (пример такого потенциала изображен на рисунке 16). Пусть V_1, V_2, V_3 , обозначают постоянные уровни потенциала, от меньшего к большему. Решения для случаев $V_1 < E < V_2$ и $V_2 < E < V_3$, которые мы будем называть нижним и верхним соответственно, удовлетворяют разным ограничениям на уровни энергии. Пусть $k_1 = \sqrt{E - V_1}, k_2 = \sqrt{E - V_2}, k_3 = \sqrt{E - V_3}$ и введем сокращение:

$$T_r(E) = \tan(k_1 r). \quad (70)$$

Ограничения на энергии симметрических и асимметрических решений следующие:

$$\begin{aligned} \text{для симм.: } T_r(E) &= \frac{k_2}{k_1} \tan \left(\arctan \left(\frac{k_3}{k_2} \right) - k_2 h \right), \\ \text{для асимм.: } T_r(E) &= -\frac{k_2}{k_1} \cot \left(\arctan \left(\frac{k_3}{k_2} \right) - k_2 h \right) \end{aligned} \quad (71)$$

Эти уравнения покрывают случай $E < V_2$, при комплексных значениях k_2 . Однако, в дальнейшем иногда удобнее будет использовать другое выражение для правой части этих уравнений, которое избегает применения комплексных

чисел (здесь $\tilde{k}_2 = \sqrt{V_2 - E}$):

$$\begin{aligned} T_r(E) &= \frac{\tilde{k}_2}{k_1} \tanh \left(\operatorname{arctanh} \left(\frac{k_3}{\tilde{k}_2} \right) + \tilde{k}_2 h \right) = \\ &= \frac{\tilde{k}_2}{k_1} \coth \left(\operatorname{arccoth} \left(\frac{k_3}{\tilde{k}_2} \right) + \tilde{k}_2 h \right) \quad (72) \end{aligned}$$

2.2.3 Существование связанных состояний

Созданные функции могут быть использованы чтобы найти верхнюю границу для дискретного спектра \hat{H} .

Теорема 2.2.2. *Потенциал ступенчатой ямы (см. рисунок 16) всегда имеет хотя бы одно собственное значение ниже непрерывного спектра σ_c .*

Доказательство. Обозначим правую часть (70) как $T(E)$, а через $K(E)$ - правую часть (71) (или (72), что эквивалентно). Мы докажем что существует интервал, на котором $T(E) - K(E)$ непрерывно и принимает значения разного знака на границах. Отметим, что в пограничных случаях $V_2 = V_1, V_2 = V_3, h = 0$ или $h = W$, задача превращается в квадратную потенциальную яму, для которой существование связанного состояния доказано.

Сначала отметим что $T(V_1) = 0$ и $K(+0) = +\infty$. Единственными точками разрыва функций являются вертикальные асимптоты. Обозначим эти асимптоты A_T и A_K для T и K соответственно. Тогда $T(A_T - 0) = +\infty, K(A_K - 0) = -\infty$, и следовательно если $\min(A_T, A_K) \leq V_3$, тогда интервал $(0, \min(A_T, A_K))$ является искомым.

Теперь рассмотрим случай $\min(A_T, A_K) > V_3$. Зафиксируем некоторые значения параметра W и V_2 . Здесь $T(V_3) > 0$. Докажем что $K(V_3) \leq 0$ для всех важных для нас h . Уравнение для асимптот $K(E)$ может быть представлено в виде

$$\cot(k_2 h) = -\frac{k_3}{k_2},$$

который показывает что с увеличением h , A_K монотонно убывает, таким образом $K(E)$ непрерывно на (V_1, V_3) , только для значений h от 0, до точки в

которой $A_K = V_3$. Функция $K(V_3) = -\frac{k_2}{k_1} \tan(k_2 h)$ монотонно убывающая функция и когда $h = 0$, $K(V_3) = 0$. Это доказывает $K(V_3) \leq 0$, при $A_K > V_3$, и следовательно, интервал (V_1, V_3) является искомым интервалом. \square

Следствие 2.2.1. *Главный оператор \hat{H} имеет хотя бы одно связанное состояние.*

Доказательство. Непрерывный спектр оператора $\sigma_c(\hat{H}) = (V_3, +\infty)$. Сконструированная функция удовлетворяет условию $\frac{(\hat{H}\psi, \psi)}{(\psi, \psi)} = E$, и может быть аппроксимирована до произвольной степени функциями из области определения оператора. Следовательно, значение E из теоремы 2.2.2 - верхняя граница для дискретного спектра \hat{H} . \square

2.2.4 Результаты

Теперь рассмотрим построенные уровни энергии как функции от параметра h . В то время как V_2 изменяется, отметим, что пограничные случаи $V_2 = V_1$ и $V_2 = V_3$, производят потенциалы формы квадратной ямы, ширины $W + h$ и $W - h$, которые с увеличением h становятся шире и уже соответственно. Если зафиксировать V_2 , увеличение h от 0 до W , превращает узкий колодец (W, V_3) , в широкий колодец $(2W, V_2)$, в то время как уровни энергии меняются непрерывным образом.

Как было описано выше, построенные функции, при достаточно большом L , позволяют нам выбрать один из двух поперечных собственных значений: $\tilde{E}_1 < a_1$ и $\tilde{E}_2 > a_2$ для каждого региона, и хотя регионы с $a_1 = a_2$ порождают близкие значения, регионы с разными интенсивностями (те что соответствуют V_2), производят собственные значения с большим промежутком между ними. Выбор между двумя значениями в каждом регионе соответствует собственным функциям ψ симметрического и асимметрического типов. Используя результаты, мы можем заключить что их уровни энергии преобразуются по-разному. Рассматривая симметрический тип, из рисунка 16 мы можем видеть что наименьшее собственное значение монотонно возрастает, до тех пор пока оно не выходит из полосы под V_2 и достигает наименьшего значения самой широкой квадратной ямы $(2W, V_2)$. Говоря о реальных системах, большой промежуток

между первым собственным значением и границей непрерывного спектра обеспечивает большую стабильность связанного состояния по отношению к внешним воздействиям. Это значит что связанные состояния с таким поведением более стабильны для малых \hbar .

Как было упомянуто во вступлении к секции, рассмотренная система может быть использована как простейшая модель взаимодействия длинных молекул (например ДНК-подобных, или протеин-подобных). В частности, это может быть полезно для лучшего понимания первых стадий процесса присоединения вирусной ДНК и молекулой организма (распознавание идентификатора из символов и фиксация), см. например [66].

2.3 Потенциал на прямой в 3D

Настоящая секция включает в себя результаты опубликованные нами в работе [43]. Система на которой сфокусирована данная секция состоит из прямой линии в \mathbb{R}^3 , с притягивающим δ -потенциалом, с варьирующейся интенсивностью. Исследование, в основном, руководствуется последовательностью шагов из [53].

2.3.1 Гамильтониан для провода в 3D

Опишем систему. Притягивающий потенциал сосредоточен на прямой линии в трехмерном пространстве. Интенсивность потенциала равна $-(\alpha + \beta(s))$, где $\alpha > 0$ это константа, и $0 \leq \beta(s) \in C(a, b) \setminus \{0\}$ - это локализованная функция от переменной s - расстояния вдоль прямой от начала координат, которая равна нулю вне некоторого произвольного конечного интервала $[a, b]$. Мы выбираем начало координат на прямой так, чтобы $\beta(0) \neq 0$. Заметим, что интервал на котором функция не обнуляется потенциально может быть расширен.

Сначала, следуя [53], мы описываем оператор $-\Delta_{\alpha, \beta}$, который является самосопряженным расширением симметрического оператора $-\Delta : C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$, и затем мы конструируем его резольвенту.

Рассмотрим прямую линию Γ , определенную функцией $\gamma(s) = (0, 0, s) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$. Введем сдвинутую линию Γ_r , которая соответствует $\gamma_r(s) = (\xi, \eta, s); (\xi^2 +$

$\eta^2)^{1/2} = r$. Пусть $f \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma)$, и $f_{\Gamma_r}(s)$ - ее вложение в Γ_r ; $r > 0$.

Определение 2.3.1. Функция $f \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma) \cap L^2(\mathbb{R}^3)$ принадлежит $D(-\Delta_{\alpha,\beta})$ если выполняются следующие условия:

1) Существуют пределы

$$\Xi(f)(s) = -\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{\ln r} f_{\Gamma_r}(s),$$

$$\Upsilon(f)(s) = -\lim_{r \rightarrow 0} (f_{\Gamma_r}(s) + \Xi(f)(s) \ln r),$$

т.е. лежат в \mathbb{R} , не зависят от направления $\frac{1}{r}(\xi, \eta)$, и определяют функции из $L^2(\mathbb{R})$,

2) Имеют место следующие условия:

$$2\pi(\alpha + \beta(s))\Xi(f)(s) = \Upsilon(f)(s).$$

Наконец, мы определяем оператор $-\Delta_{\alpha,\beta} : D(-\Delta_{\alpha,\beta}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ который действует как

$$-\Delta_{\alpha,\beta} f(x) = -\Delta f(x), \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \Gamma.$$

Для описания $\sigma(-\Delta_{\alpha,\beta})$ полезным будет следующее утверждение из [68]:

Утверждение 2.3.1. Система с одноточечным взаимодействием в \mathbb{R}^2 , имеет следующий спектр с единственной точкой дискретного спектра:

$$\sigma_{\text{ess}} = [0, \infty)$$

$$\sigma_{\text{disc}} = \{\xi_{1,\alpha}\}$$

$$\xi_{1,\alpha} = -4e^{2(-2\pi\alpha + \psi(1))},$$

где $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$, $\Gamma(x)$ - это гамма-функция Эйлера, $\psi(1) \approx 0.5772$ - это константа Эйлера.

Теперь мы конструируем резольвенту оператора $-\Delta_{\alpha,\beta}$. Свободная резольвента имеет вид: $R_z = (-\Delta - z)^{-1} : L^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow H^2(\mathbb{R}^3)$, z принадлежит резольвентному множеству $z \in \rho(-\Delta)$.

Мы определяем ограниченный отображающий оператор прямой:

$$(\tau\phi)(s) = \phi(s, 0, 0) : H^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$$

Его сопряженный $\tau^* : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow H^{-2}(\mathbb{R}^3)$ определяется следующим выражением,

$$\langle \tau^* h, \omega \rangle = (h, \tau \omega), h \in L^2(\mathbb{R}), \omega \in H^{-2}(\mathbb{R}^3)$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle$ обозначает соответствие между $H^{-2}(\mathbb{R}^3)$ и $H^2(\mathbb{R}^3)$.

Введем самосопряженный оператор

$$\begin{aligned} T_\kappa f(s) &= \int_{\mathbb{R}} (\check{T}_\kappa(s-s') + \frac{1}{2\pi}(\ln 2 + \psi)) f(s') ds' = \\ &= F^{-1} \left[\frac{1}{2\pi} \left(-\ln \left[(p^2 + \kappa^2)^{0.5} \right] + (\ln 2 + \psi) \delta(p) \right) \hat{f}(p) \right] \\ \check{T}_\kappa(s-s') &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}} \ln \left[(p^2 + \kappa^2)^{0.5} \right] e^{ip(s-s')} dp, \end{aligned}$$

с областью определения $D(T_\kappa) = f \in L^2(\mathbb{R}) : \int_{\mathbb{R}} \check{T}_\kappa(s-s') f(s') ds' \in L^2(\mathbb{R})$, где $\psi \approx 0.577$ - число Эйлера, и $Ff = \hat{f}$ - преобразование Фурье.

Наконец, мы определяем самосопряженный оператор

$$Q^\kappa f(s) = (T_\kappa - \beta(s))f(s) : D(T_\kappa) \rightarrow L^2(\mathbb{R}).$$

Теперь мы можем составить резольвенту главного оператора, следуя теоремам из [53]:

$$R_{\beta, \alpha}^\kappa = R_\kappa - R_\kappa^* \tau^* (Q^\kappa - \alpha) \tau R_\kappa \quad (73)$$

2.3.2 Существование связанных состояний

Обозначим $\beta_0 > 0$ и $\beta_w > 0$, любые два достаточно малых числа, таких что $\beta(x) > \beta_0; \forall |x| < \beta_w/2$, и $\sup \beta(s) = \beta_s$.

Сначала, заметим что $\beta(s)$, будучи локальным возмущением, не меняет непрерывный спектр основного оператора:

$$\sigma_{ess}(-\Delta_{\alpha, \beta}) = \sigma_{ess}(-\Delta_\alpha) = [\xi_{1, \alpha}, \infty) = [-4e^{2(-2\pi\alpha + \psi)}, \infty)$$

Используя представление в "импульсной" системе координат оператора T_κ и локальность $\beta(s)$, мы можем получить

$$\sigma_{ess}(T_\kappa) = \sigma_{ess}(Q^\kappa) = (-\infty, s_\kappa]$$

$$s_\kappa = \frac{1}{2\pi} \left(\psi(1) - \ln \frac{\kappa}{2} \right)$$

Отметим что $s_\kappa = \alpha$ соответствует $-\kappa^2 = \xi_{1,\alpha}$ основного оператора.

Лемма 2.3.1. $\sup \sigma(Q^\kappa) = \sup \sigma(T_\kappa - \beta(s)) > s_\kappa$

Доказательство. Лемма эквивалентна следующему утверждению:

$$(Q^\kappa \phi, \phi) - s_\kappa(\phi, \phi) > 0,$$

для любого $\phi \in D(Q^\kappa)$. Пусть $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, такое, что $\exists C > 0, \delta > 0 : \phi(s) > C, |s| < \delta$ и мы будем использовать $\phi_\lambda(s) = \lambda^{0.5} \phi(\lambda s); \lambda > 0$, заметим также $\phi(\lambda s) > C, |s| < \delta$, и $\|\phi_\lambda\| = \|\phi\|$. Получаем

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \ln \left[\left(1 + \frac{\lambda^2 u^2}{\kappa} \right)^{0.5} \right] |F\phi(u)|^2 du + \lambda \int_{\mathbb{R}} \beta(s) |\phi(\lambda s)|^2 ds > 0,$$

где первый член может быть представлен как $-\frac{1}{4\pi} \left(\frac{\lambda}{\kappa} \right)^2 \int_{\mathbb{R}} u^2 |F\phi(u)|^2 du + \mathcal{O}(\lambda^4)$, и второй член: $\lambda \int_{\mathbb{R}} \beta(s) |\phi(\lambda s)|^2 ds > \lambda \int_{-\delta}^{\delta} \beta(s) C^2 ds > 2\delta C \beta_0 \beta_w$. Таким образом, если λ достаточно мала, второй член отклоняет сумму в положительную сторону. \square

Лемма 2.3.2. Функция $\kappa \rightarrow Q^\kappa$ непрерывно в смысле нормы операторов на (κ_0, ∞) , и

$$\lim_{\kappa \rightarrow \infty} \sup \sigma(Q^\kappa) = -\infty \quad (74)$$

Доказательство. Функция $\kappa \rightarrow T_\kappa$ непрерывна в смысле операторной нормы:

$$\begin{aligned} \|(T_\kappa - T_{\kappa'})f\| &= \frac{1}{4(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}} \left(\ln \frac{p^2 + \kappa^2}{p^2 + \kappa'^2} \right)^2 |Ff(p)|^2 dp \leq \\ & \frac{1}{4(2\pi)^3} \left(\ln \frac{\kappa}{\kappa'} \right)^2 \|f\|^2 \xrightarrow{\kappa' \rightarrow \kappa} 0 \end{aligned}$$

и $\beta(s)$ независима от κ , так что $Q^\kappa = T_\kappa - \beta(s)$ непрерывна. Предел (74) следует из следующего:

$$\begin{aligned} (Q^\kappa f, f) &= \\ & \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}} \left(-\ln \sqrt{p^2 + \kappa^2} + \ln 2 + \psi(1) \right) \left| \hat{f}(p) \right|^2 dp + (\beta(s)f, f) \leq \\ & \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(-\ln \frac{\kappa}{2} + \psi(1) \right) \|f\|^2 + \beta_s \|f\|^2 \end{aligned}$$

Теперь, аналогично теореме 5.6 из [53], мы готовы доказать существование хотя бы одного связанного состояния.

Теорема 2.3.1. *Оператор $-\Delta_{\alpha,\beta}$ имеет по крайней мере одно изолированное собственное значение на $(-\infty, \xi_{1,\alpha})$.*

Доказательство. Добавление локализованного потенциала $\beta(s)$ может изменить только дискретную часть спектра, т.е. для главного оператора - часть, лежащую в $(-\infty, \xi_{1,\alpha})$ и для Q^κ , она принадлежит (s_κ, ∞) . Затем, в соответствии с леммой 2.3.1, существует по крайней мере одна точка дискретного спектра Q^κ , $\lambda(\kappa)$. По лемме 2.3.2, $\lambda(\kappa)$ непрерывна и $\lambda \rightarrow -\infty$ в то время как $\kappa \rightarrow \infty$. Отсюда $\exists \kappa' > |\xi_{1,\alpha}|^{0.5} : \lambda(\kappa') = \alpha$. Точка $-\kappa'^2$ это полюс резольвенты (73), и, следовательно, собственное значение основного оператора. □

2.3.3 Верхняя граница для числа связанных состояний

Теперь мы используем метод Бирмана-Швингера (см. [78]), чтобы получить верхнюю границу для количества собственных значений основного оператора.

Построим оператор Бирмана-Швингера, который мы будем использовать для подсчета собственных значений.

$$\begin{aligned} Q^\kappa f - \alpha f &= 0 \\ T_\kappa f - \alpha f - \beta(s)f &= 0 \\ K_\kappa f &\equiv (T_\kappa - \alpha)^{-1} (\beta(s)f) = f \end{aligned}$$

Здесь, если f это собственный вектор оператора Q^κ , соответствующий собственному значению $\lambda_Q = \alpha$, тогда это собственный вектор оператора K_κ , соответствующий собственному значению $\lambda_K = 1$. Также, отметим что собственные значения оператора Q^κ являются монотонно убывающими функциями от κ , и поэтому, собственные значения K_κ - тоже, таким образом, если мы зафиксируем κ , для каждой точки дискретного спектра основного оператора $-\Delta_{\alpha,\beta}$, существует соответствующее ей собственное значение оператора Q^κ , большее чем α , и соответствующее собственное значение оператора K_κ , большее чем 1.

суммируя все эти собственные значения оператора K_κ , мы получим верхнее ограничение на количество собственных значений $\lambda(Q^\kappa) > \alpha$ и, следовательно, количество точек дискретного спектра оператора $-\Delta_{\alpha,\beta}$, меньших чем $-\kappa^2$. Чтобы покрыть все множество $\sigma_{disc}(-\Delta_{\alpha,\beta})$, мы приближаемся к границе спектра $\sigma_{ess}(-\Delta_{\alpha,\beta})$ и получаем основную оценку:

Утверждение 2.3.2. *Количество точек в дискретном спектре $\sigma_{disc}(-\Delta_{\alpha,\beta})$, имеет следующую верхнюю границу:*

$$\#\sigma_{disc}(-\Delta_{\alpha,\beta}) \leq \lim_{-\kappa^2 \uparrow \xi_{1,\alpha}} \int_{\mathbb{R}^2} \left(\int \frac{e^{2\pi i(s-p)w}}{-\ln\sqrt{w^2 + \kappa^2} + (-\ln\frac{\kappa}{2} + \psi(1) - \alpha)\delta(w)} dw \beta(p) \right)^2 dsdp$$

2.3.4 Дополнение: Транспортные характеристики системы из двух одномерных колец в \mathbb{R}^3

В данном пункте представляются результаты из нашей статьи [45]. Рассматривается система из одномерных квантовых проводов в \mathbb{R}^3 (в отличие от предыдущего пункта, речь идет не о негерметичных "quantum leaky wires"), под действием внешнего магнитного поля. Провода образуют два пересекающихся кольца, а также присутствует входящий и исходящий канал.

Структуры такого типа можно встретить среди макромолекул, например, молекул дифенила. Дискретная модель молекул дифенила была описана в [80]. Эта молекула содержит связанные некомпланарные кольца, как и в нашей модели. Мы строим разрешимую непрерывную модель в отличие от дискретной модели в [80]. Наша модель упрощает выбор параметров системы для лучшего контроля электронного транспорта.

С помощью теории квантовых графов изучены транспортные свойства такой системы, а именно зависимость коэффициента прохождения от параметров системы.

Теоретическая модель На рисунке 17 показана предлагаемая модель квантового устройства, состоящего из двух колец. Одно кольцо находится в плоскости ZOY, а другое - в плоскости XOY. Эти два кольца ортогональны друг

другу и имеют точку пересечения. Устройство также имеет входной провод, который подключен к первому (левому) кольцу. Второе (правое) кольцо оснащено выходным проводом. Правое кольцо может вращаться вокруг оси Y , в то время как левое закреплено, а вектор магнитного поля направлен вдоль оси Z и не меняет своего направления. Для квантовых проводов рассматривается одномерное приближение, за основу взята теория квантовых графов и проблема рассеяния.

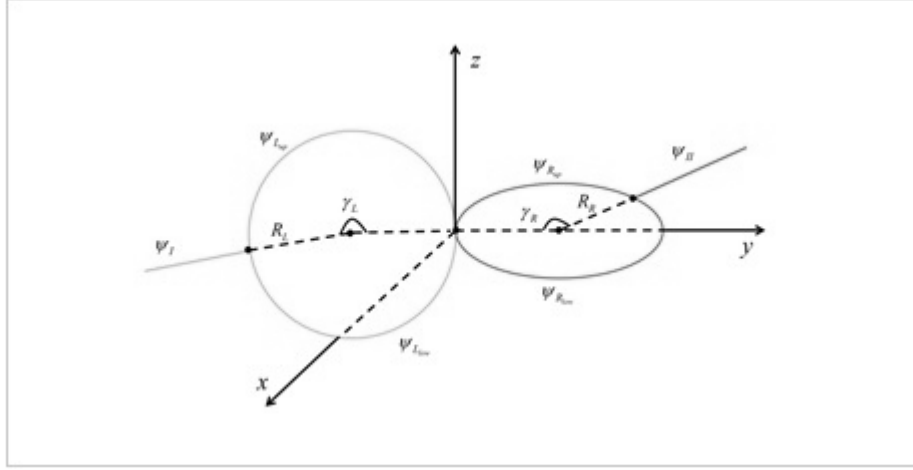


Рисунок 17 – Квантовый граф с двумя полу-бесконечными каналами (входной и выходной квантовые провода) и четырьмя отрезками, которые образуют два кольца. $R_L(R_R)$ - радиусы колец, $\gamma_L(\gamma_R)$ - углы между входными (выходными) проводами и точкой соединения.

Функции во входящих и выходящих проводах обозначаются: $\psi_I(x_I), \psi_{II}(x_{II})$, и могут быть записаны как

$$\psi_I(x_I) = e^{ikx_I} + C_1 e^{-ikx_I}, \quad \psi_{II}(x_{II}) = C_{10} e^{ikx_I}, \quad (75)$$

для верхней и нижней частей двух одинаковых колец:

$$\begin{aligned} \psi_{Lup}(\gamma) &= C_2 e^{ikR_L\gamma} + C_3 e^{-ikR_L\gamma}, \\ \psi_{Llow}(\gamma) &= C_4 e^{ikR_L\gamma} + C_5 e^{-ikR_L\gamma}, \\ \psi_{Rup}(\gamma) &= C_6 e^{ikR_R\gamma} + C_7 e^{-ikR_R\gamma}, \\ \psi_{Rlow}(\gamma) &= C_8 e^{ikR_R\gamma} + C_9 e^{-ikR_R\gamma}, \end{aligned} \quad (76)$$

где $R_L(R_R)$ - радиус левого (правого) кольца, γ - угол между стыками колец и проводов, k - волновое число.

Магнитные условия Кирхгофа в вершинах графа имеют следующий вид:

$$\begin{cases} e^{(-1)^\mu i\Phi_e(\gamma_e)}\psi_e(\gamma_e) = \psi_{e'}(\gamma_e)e^{(-1)^\mu i\Phi_{e'}(\gamma_e)} \\ \sum_e (-1)^{[e]} \partial\psi_e(\gamma_e)e^{(-1)^\mu i\Phi_e(\gamma_e)} = 0, \end{cases}, \quad (77)$$

где $[e] = 0$ для выходного ребра и $[e] = 1$ для входного ребра, γ_e - угол между стыками колец и проводов. Поскольку ориентации ребер в некоторых точках не будут совпадать с параметрами на кольце, мы будем учитывать отрицательный знак перед Φ_e , поэтому μ равно 0 или 1, в зависимости от ориентации. Кроме того,

$$\Phi_e = \begin{cases} 0, \\ \int_{\gamma_e} a(\tau)d\tau, \end{cases}, \quad (78)$$

где 0 находится в начале ребра, $\int_{\gamma_e} a(\tau)d\tau$ - в конце.

Как упоминалось ранее, магнитное поле предполагается направленным вдоль оси Z , поэтому $\Phi_1(\gamma) = \frac{1}{2}BR_L^2\gamma \sin(\alpha)$, $\Phi_2(\gamma) = \frac{1}{2}BR_R^2\gamma \cos(\alpha)$, где $\Phi_1(\gamma)$ принадлежит кольцу в плоскости ZOY , $\Phi_2(\gamma)$ принадлежит кольцу в плоскости $ХОУ$, α является углом поворота вокруг оси Y .

Используя магнитные условия Кирхгофа и выражения для каналов, ребер и для $\Phi_1(\gamma)$, $\Phi_2(\gamma)$, получаем следующие условия для вершин графа:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{L_{up}}(0) = \psi_{L_{low}}(2\pi)e^{i\Phi_1(2\pi)}, \\ -\psi'_I(0) + \psi'_{L_{up}}(0) - \psi'_{L_{low}}(2\pi)e^{i\Phi_1(2\pi)} = 0, \end{cases}, \quad (79)$$

для первой вершины (точка пересечения входящего провода и левого кольца).

Для второй вершины (точка соединения двух колец) уравнения имеют вид:

$$\begin{cases} \psi_{L_{up}}(\pi)e^{i\Phi_1(\pi)} = \psi_{L_{low}}(\pi)e^{i\Phi_1(\pi)} = \psi_{R_{up}}(0) = \psi_{R_{low}}(2\pi)e^{i\Phi_2(2\pi)}, \\ -\psi'_{L_{up}}(\pi)e^{i\Phi_1(\pi)} + \psi'_{L_{low}}(\pi)e^{i\Phi_1(\pi)} + \psi'_{R_{up}}(0) - \psi'_{R_{low}}(2\pi)e^{i\Phi_2(2\pi)} = 0. \end{cases}. \quad (80)$$

Для третьей вершины (точка соединения выходящего провода и правого кольца) уравнения имеют вид:

$$\begin{cases} \psi_{R_{up}}(\pi)e^{i\Phi_2(\pi)} = \psi_{R_{low}}(0) = \psi_{II}(0), \\ -\psi'_{R_{up}}(\pi)e^{i\Phi_2(\pi)} + \psi'_{R_{low}}(0) + \psi'_{II}(0) = 0. \end{cases}. \quad (81)$$

Поскольку левое кольцо предлагается закрепить относительно магнитного поля, α для левого кольца равно 0. Это означает, что $\Phi_1(\gamma) = 0$ и имеет место следующая система уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 + C_1 - C_2 - C_3 = 0 \\ C_2 + C_3 - C_4 e^{ikR_L 2\pi} - C_5 e^{-ikR_L 2\pi} = 0, \\ -ik + ikC_1 + ikR_L C_2 - ikR_L C_3 - ikR_L C_4 e^{ikR_L 2\pi} + ikR_L C_5 e^{-ikR_L 2\pi} = 0 \\ C_2 e^{ikR_L \pi} + C_3 e^{-ikR_L \pi} - C_4 e^{ikR_L \pi} - C_5 e^{-ikR_L \pi} = 0 \\ C_4 e^{ikR_L \pi} + C_5 e^{-ikR_L \pi} - C_6 - C_7 = 0 \\ C_6 + C_7 - (C_8 e^{ikR_R 2\pi} + C_9 e^{-ikR_R 2\pi}) e^{i\Phi_2(2\pi)} = 0 \\ -ikR_L C_2 e^{ikR_L \pi} + ikR_L C_3 e^{-ikR_L \pi} + ikR_L C_4 e^{ikR_L \pi} - ikR_L C_5 e^{-ikR_L \pi} + \\ + (ikR_R C_6 - ikR_R C_7) - (ikR_R C_8 e^{ikR_R 2\pi} - ikR_R C_9 e^{-ikR_R 2\pi}) e^{i\Phi_2(2\pi)} = 0 \\ (C_6 e^{ikR_R \pi} + C_7 e^{-ikR_R \pi}) e^{i\Phi_2(\pi)} - C_8 - C_9 = 0 \\ C_8 + C_9 - C_{10} = 0 \\ -(ikR_R C_6 e^{ikR_R \pi} - ikR_R C_7 e^{-ikR_R \pi}) e^{i\Phi_2(\pi)} + (ikR_R C_8 - ikR_R C_9) + ikC_{10} = 0 \end{array} \right. \quad (82)$$

Далее, используя метод Гаусса, мы можем получить все неизвестные коэффициенты C_1, C_2, \dots, C_{10} . Наконец, коэффициент отражения можно записать как $R_{ref} = C_1 \cdot C_1^*$, коэффициент передачи: $T = C_{10} \cdot C_{10}^*$.

Численные результаты В этом разделе мы приводим численное исследование, чтобы проиллюстрировать некоторые важные характеристики транспорта электронов в предложенном устройстве. Также было получено влияние на коэффициент прохождения различных параметров системы, таких как угол поворота α , радиусы колец R_L, R_R , волновое число k , углы между каналами и точкой крепления колец $\gamma_L = \gamma_R$ и магнитной индукции B .

На рисунке 18 показаны коэффициент прохождения электронов T и коэффициент отражения R_{ref} , как функции от угла поворота α для выбранных значений параметров: $R_L = R_R = 1.14, k = 0.18, \gamma_L = \gamma_R = \pi$ на рисунке 18(слева) и $R_L = R_R = 1.2, k = 0.77, \gamma_L = \gamma_R = \pi$ на рисунке 18(справа). Видно, что коэффициент прохождения T и коэффициент отражения R_{ref} не равны нулю. Также можно найти такие значения угла поворота, когда $T = 1$ и $R_{ref} = 0$, а это означает, что имеет место идеальное прохождение (волна

полностью проходит в выходном проводе). Кроме того, существуют интервалы значений α , когда R_{ref} близок к 1, а T близок к 0, то есть имеет место идеальное отражение.

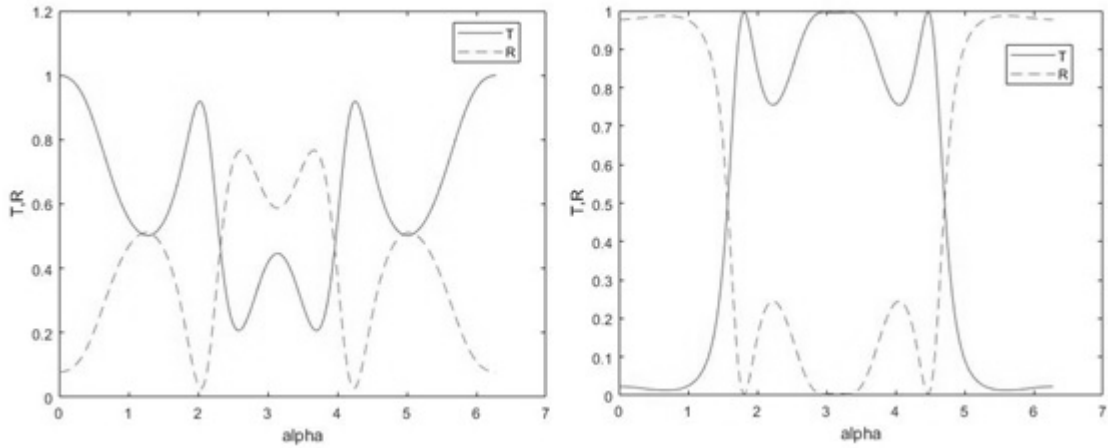


Рисунок 18 – Коэффициент прохождения электронов T и коэффициент отражения R_{ref} как функции угла поворота α , при $R_L = R_R = 1.14, k = 0.18, \gamma_L = \gamma_R = \pi$ (слева), $R_L = R_R = 1.2, k = 0.77, \gamma_L = \gamma_R = \pi$ (справа), α меняется от 0 до 2π .

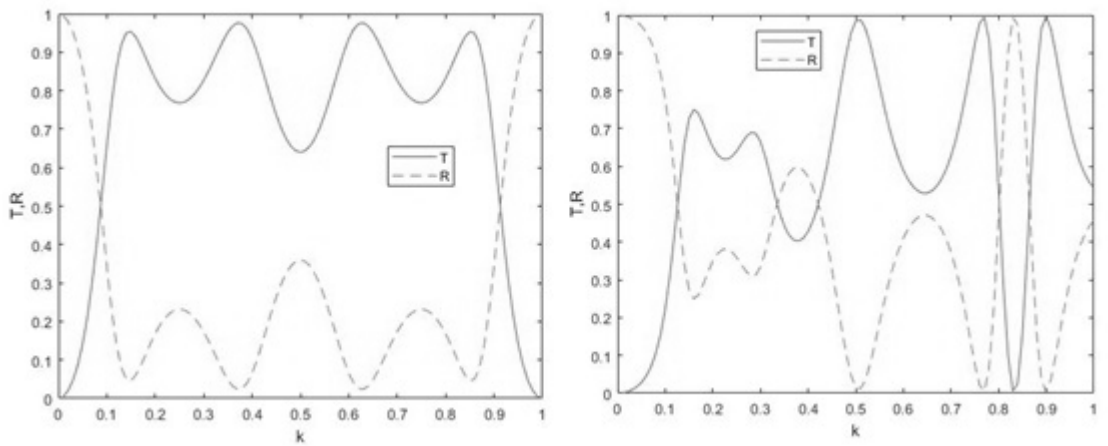


Рисунок 19 – Коэффициент прохождения электронов T и коэффициент отражения R_{ref} как функции волнового числа k для $\alpha = \pi, \gamma_L = \gamma_R = \pi, R_L = R_R = 1$, (слева), $R_L = R_R = 1.2$ (справа).

На рисунке 19 показана зависимость коэффициента прохождения электронов T и коэффициента отражения R_{ref} от волнового числа k для выбранных значений параметров: $R_L = R_R = 1, \alpha = \pi, \gamma_L = \gamma_R = \pi$ на рисунке 19 (слева),

$R_L = R_R = 1.2, \alpha = \pi, \gamma_L = \gamma_R = \pi$, на рисунке 19(справа). Поведение коэффициентов аналогично рисунку 18. Существуют такие значения волнового числа, при которых происходит идеальное прохождение (отражение).

Когда угол поворота $\alpha = \pi$, кольца компланарны и существует очень высокая вероятность идеальной передачи электронов. Эти результаты подтверждаются несколькими работами [81] о свойствах спин-фильтрации в двух связанных квантовых кольцах Рашбы.

Но изменение геометрии модели - не лучший способ контролировать передачу электронов. Лучшим способом является магнитный поток.

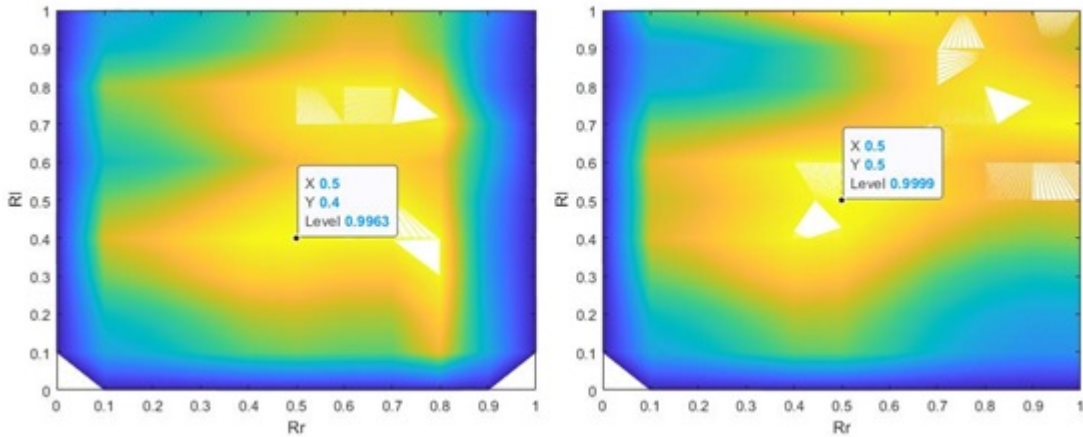


Рисунок 20 – Контурная карта коэффициента пропускания электронов T в зависимости от радиусов колец для $k = 0.77, \gamma_L = \gamma_R = \pi, \alpha = 1.8 \text{ rad}$ (слева), $\alpha = \pi$ (справа).

На рисунке 21 показано влияние магнитного поля на транспортные свойства. Для выбранных из рисунков 18 – 20 значений угла поворота α , радиусов колец, волнового числа и углов перехода, коэффициент прохождения электронов T и коэффициент отражения R_{ref} , представлены как функции от B . На рисунке 21 видно, что идеальная передача происходит когда B становится 0.31, 0.66.

В данной секции была рассмотрена модель двух квантовых колец и были представлены подходящие значения волнового числа, угла поворота, радиусов колец и углов между точками соединения, при которых коэффициент прохождения T близок к 1, т.е. происходит идеальная передача электронов. Данные

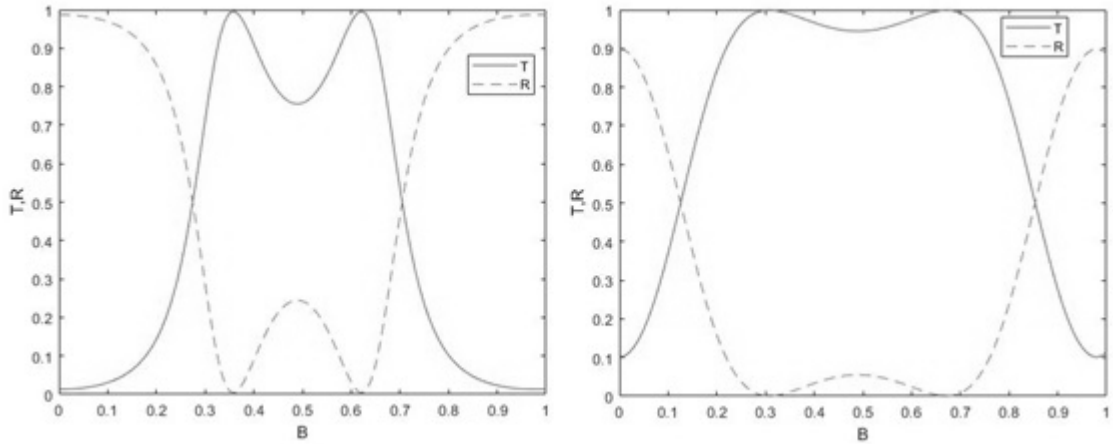


Рисунок 21 – Коэффициент прохождения электронов T и коэффициент отражения R_{ref} как функции от B для $R_L = R_R = 1.2, \alpha = 1.8 \text{ rad}, \gamma_L = \gamma_R = \pi, k = 0.44$ (слева), $k = 0.51$ (справа).

результаты позволяют проектировать устройства, использующие вариацию параметров системы для контроля транспортных характеристик.

2.3.5 Выводы

Во второй главе рассматривались системы с дельта-потенциалами на прямых в двух и трех измерениях. Был доказан ряд теоретических результатов для двух типов геометрий систем, в частности доказано существование связанных состояний. Также для случая двухмерной системы предложен подход к исследованию спектра с помощью определенной тестовой функции. В случае трехмерной системы был продемонстрирован способ применения метода Бирмана-Швингера для ограничения количества связанных состояний.

В следующей главе мы переходим к рассмотрению другого типа систем в трехмерном пространстве. В этом случае сингулярное взаимодействие будет вызвано другими частицами.

Глава 3. Два проводящих слоя в \mathbb{R}^3

В этой главе мы исследуем трехмерные квантовые системы со сложной геометрией. Конкретнее, рассматриваются одночастичные и многочастичные задачи, в которых частицы заключены внутри двух проводящих слоев, соединенных между собой через отверстия. Кроме того накладывается внешнее электрическое поле. Вопрос интересующий нас - это зависимость спектра (как дискретной части, так и непрерывной) оператора от параметров системы. В первой секции мы используем теорию операторов для получения некоторых обобщенных аналитических результатов, а затем, во второй секции, при помощи численных методов в подробностях изучаем влияние параметров системы на собственные энергии и предлагаем некоторую классификацию связанных состояний системы, по количеству и расположению зон знакопостоянства.

3.1 Пара проводящих слоев: Аналитические результаты

В общем случае волноводы могут быть смоделированы Лапласианами с граничными условиями Дирихле, в бесконечных плоских полосах и многомерных слоях. Их спектры являются предметом внимания многих работ последних десятилетий. Проблема тривиальна до тех пор, пока полоса или слой прямые, поскольку тогда можно применить метод разделения переменных. Однако, уже локальное возмущение, такое как изгиб, деформация, или изменение граничных условий, может привести к появлению непустого дискретного спектра. В качестве примеров возможных возмущений, мы указываем локальную деформацию граничных условий [85, 86], изгиб [87, 88, 89, 90] или скручивание [91, 92] волновода. Возмущение добавлением потенциала рассматривается в [87], магнитного поля - в [93, 94] или дифференциального оператора второго порядка, как в [95]. Интересующий нас тип систем - это два соседних параллельных волновода, соединенных окнами, вырезанными в общей границе. Двумерный случай изучался

достаточно интенсивно, мы ссылаемся на [96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 114, 112] (см. также ссылки в них). Было показано, что возмущение окном(ами) является отрицательным, т.е. приводит к наличию изолированных связанных состояний ниже существенного спектра; последний инвариантен по отношению к окну(ам). В случае одного окна, в [96, 98, 100] было показано, что расширение окна приводит к появлению все большего числа изолированных собственных значений. Они появляются, когда длина окна проходит через определенные критические значения. Это явление было подробно изучено и получены асимптотические разложения для возникающих собственных значений, см. в [96, 98, 102]. В трехмерном случае, соответствующем слоям с оконной связью, П. Экснер и С. Вугальтер показали, что небольшое окно порождает одно простое изолированное собственное значение, возникающее у порога существенного спектра [101]. Они также получили двусторонние асимптотические оценки для этого собственного значения. Асимптотическое расширение для этого собственного значения было формально построено в [103]. Еще один пример связи трехмерных волноводов можно найти в [113].

В настоящей главе рассматривается система из двух параллельных проводящих слоев в R^3 , связанных через отверстия в общей границе. Такая система была изучена в [104], где показано, что окно порождает собственные значения, выходящие за порог существенного спектра, по мере прохождения окна через определенные критические формы. Наша система, также содержит внешнее электрическое поле.

В первой секции мы определяем Гамильтониан системы и представляем некоторые аналитические результаты. Далее, в последующих секциях, мы приводим ряд численных результатов полученных с использованием метода конечных элементов. Строятся графики зависимости собственных энергий системы от ее основных параметров.

В последней секции более подробно исследуется влияние формы окна на связанные состояния. Мы непрерывно меняем форму окна и рассматриваем эволюцию связанных состояний при фиксированном числе и положении зон знакопостоянства. Вопросы о числе и положении зон знакопостоянства для лапласианов Дирихле являются предметом активных исследований. Первым шагом была теорема Куранта об узлах, и с тех пор были исследованы различные слу-

чай, такие как узловые домены для квантовых графов ([109],[110]) и на сфере ([111]).

Также, в рамках этой геометрии мы рассматриваем случай двух частиц, с разными формами окна. Мы проводим численные расчеты, с применением метода Хартри-Фока (о точности приближения Хартри см. [108]). Что касается предыдущих исследований многочастичных задач в деформированных волноводах, см. например, [105, 106, 107]. Нас интересуют следующие два вопроса: как энергия связанных состояний и число/положение узловых доменов зависят от формы окна и какова связь между одночастичным и двухчастичным случаями.

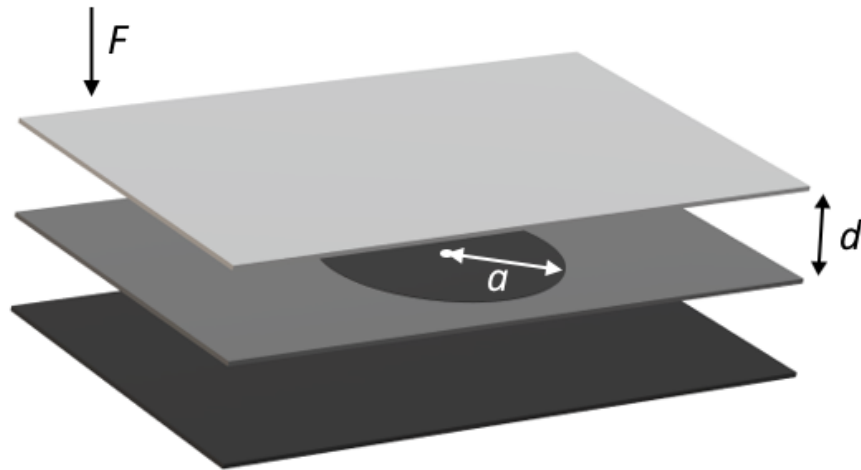


Рисунок 22 – Проводящий слой, с двумя различными граничными условиями и семейством окон на одной из границ. Приложено ортогональное электрическое поле F .

3.1.1 Описание модели

Система, которую мы собираемся изучать, представлена на рисунке 22. Мы рассматриваем квантовую частицу, заключенную внутри двух параллельных слоев, соединенных через систему окон. На границах слоев предполагается условие Дирихле. Мы моделируем окна как области на границе, где накладываются граничные условия Неймана. В этом случае достаточно иметь дело с Гамильтонианом $H(F)$ для одного слоя между плоскостями $z = 0$ и $z = d$. Мы

будем обозначать это конфигурационное пространство через Ω ,

$$\Omega = \mathbb{R}^2 \times [0, d].$$

Мы предполагаем, что частица имеет ненулевой заряд q . Также, она находится под воздействием однородного электрического поля напряженностью E , обозначим $F := Eq$. Предполагаем, что электрическое поле направлено вдоль оси Z . Без потери общности, положим $F \geq 0$.

Пусть $(\gamma_i)_{1 \leq i \leq p}$ - конечное семейство ограниченных и открытых множеств, лежащих на границе Ω при $z = 0$. Так как они открытые множества, то содержат небольшой диск радиуса a , $a > 0$. Без потери общности, предположим что центр такого диска находится в точке $(0, 0, 0)$.

Зададим $\Gamma = \partial\Omega \setminus (\cup_{i=1}^p \gamma_i)$. Мы рассматриваем граничные условия Дирихле на Γ и условия Неймана на $\cup_{i=1}^p \gamma_i$. Черная поверхность на рисунке 22 соответствует граничному условию Неймана, в то время как серые поверхности соответствуют условию Дирихле.

3.1.2 Построение Гамильтониана

Определим самосопряженный оператор на $L^2(\Omega)$ соответствующий Гамильтониану частицы, $H(F)$. Для этого мы используем квадратичные формы. Пусть $q(F)$ - это квадратичная форма

$$q(F)[u, v] = \int_{\Omega} (\nabla u \overline{\nabla v} + Fzu\bar{v}) dx dy dz, \quad u, v \in \mathcal{D}(q(F)), \quad (83)$$

где $\mathcal{D}(q(F)) := \{u \in H^1(\Omega), u|_{\Gamma} = 0\}$, $H^1(\Omega)$ - стандартное пространство Соболева и $u|_{\Gamma}$ - след функции u на Γ . Отсюда следует, что $q(F)$ - плотно определенная, симметричная, положительная и замкнутая квадратичная форма [78]. Мы обозначаем единственный самосопряженный оператор, связанный с $q(F)$ обозначим через $H(F)$ и его область \mathcal{D} . Это гамильтониан, описывающий нашу систему (в соответствующим образом масштабированных единицах и с атомными единицами $2m = \hbar = q = 1$ для упрощения уравнения). Из [78] (том 1, стр. 276) и [78] (том 4, стр. 263), следует что область \mathcal{D} имеет следующий вид:

$$\mathcal{D} = \{u \in H^1(\Omega); \quad -\Delta u \in L^2(\Omega), u|_{\Gamma} = 0, \frac{\partial u}{\partial z}|_{\cup_{i=1}^p \gamma_i} = 0\}, \quad (84)$$

и

$$H(F)u = (-\Delta + Fz)u, \quad \forall u \in \mathcal{D}. \quad (85)$$

3.1.3 Существование дискретного спектра

В данном пункте приведем две теоремы без доказательства.

Используя свойство существенного спектра сохраняться при компактных возмущениях, можно доказать его устойчивость. Напомним, что существенный спектр оператора A , который мы обозначим через $\sigma_{ess}(A)$, состоит из точек λ , в которых множество значений $\Re(\lambda I - A)$ не замкнуто, и собственных значений бесконечной кратности. Дискретный спектр - это множество изолированных собственных значений конечной кратности. Он обозначается $\sigma_{dis}(A)$. Обозначим λ_0^1 первое собственное значение поперечной части (вдоль оси Z) основного оператора.

Теорема 3.1.1. Пусть $H(F)$ - оператор, заданный (85). Тогда,

$$\sigma_{ess}(H(F)) = [\lambda_0^1, +\infty). \quad (86)$$

Далее, исходя из этого результата и принципа min-max [78], мы заключаем, что если дискретный спектр существует, то он лежит ниже λ_0^1 . Основным результатом раздела является следующая теорема:

Теорема 3.1.2. Для любого $F \geq 0$ оператор $H(F)$ имеет по крайней мере одно изолированное собственное значение ниже λ_0^1 , т.е.

$$\sigma_{dis}(H(F)) \neq \emptyset.$$

Как уже отмечалось ранее, результат отличается от результата, соответствующего двумерным волноводам. Действительно, в [115] существование дискретного спектра зависит от значений F .

Важно заметить, что электрическое и магнитное поля по-разному влияют на спектр нашей системы. Действительно, в [116] было доказано, что в случае магнитного поля, дискретный спектр существует только когда радиус окна преодолевает некоторое критическое значение.

3.2 Пара проводящих слоев: Численные расчеты

Как было показано в предыдущем разделе, собственное значение ниже существенного спектра появляется для любого радиуса окна a . По мере того, как радиус отверстия увеличивается, появляется больше изолированных собственных значений. Мы используем численные расчеты на основе метода конечных элементов для изучения этого вопроса. Кроме того, мы рассматриваем существование связанных состояний для многочастичных систем, используя подход Хартри-Фока (который более подробно описан, например, в [117]). Во всех расчетах мы используем произвольные единицы, с $\hbar = e = 1$, $m = 0.5$ (e , m - заряд и масса электрона, соответственно).

Для построения собственных функций используется метод конечных элементов, а конкретно, пакет **FreeFem++**. Некоторые примеры одночастичных связанных состояний, в срезе через плоскость отверстия, представлены на рисунке 23.

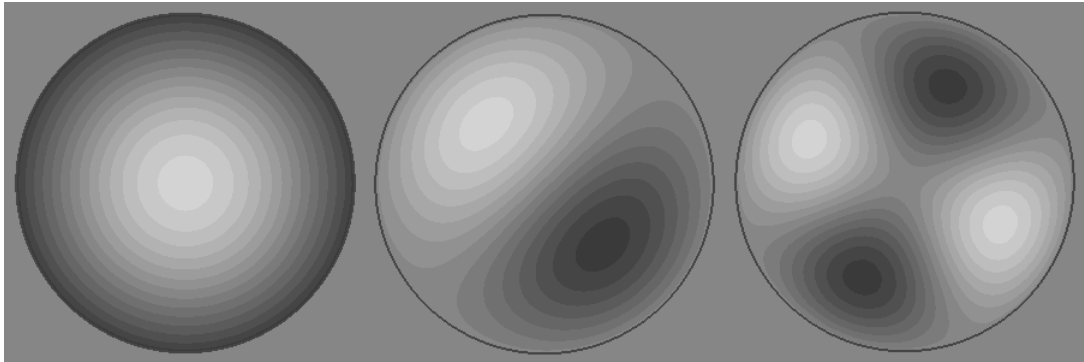


Рисунок 23 – Примеры одночастичных связанных состояний.

Начнем с описания метода Хартри-Фока, который будет использован нами для рассмотрения многочастичных задач в последующих пунктах, а также созданной на основе метода итерационной процедуры, результат которой сходится к многочастичным собственным состояниям.

3.2.1 Метод Хартри-Фока

Опишем модель Хартри-Фока и алгоритм.

Начнем с Гамильтониана

$$\hat{H} = \sum_k (-\Delta_k + U_k) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j, k \\ j \neq k}} V_{jk} = \sum_k \hat{H}_k + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j, k \\ j \neq k}} V_{jk}, \quad (87)$$

где $\Delta_k = \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$ - операторы Лапласа, действующие на координаты x_k частицы с номером k , U_k - потенциал внешнего поля, $V_{j,k}$ - потенциал взаимодействия частиц, $\hat{H}_k = (-\Delta_k + U_k)$.

Затем мы можем использовать детерминант Слейтера для аппроксимации многочастичной волновой функции:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \dots & \psi_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(x_n) & \dots & \psi_n(x_n) \end{vmatrix}, \quad (88)$$

где ψ_k - одночастичные волновые функции и $x_k = (r_k, s_k)$, где r_k и s_k - пространственные и спиновые координаты k -й частицы.

Следуя методу Хартри-Фока, мы вставляем (88) в (87) и используем вариацию функционала энергии $\langle \Psi | \hat{H} \Psi \rangle$ для получения уравнений Хартри-Фока:

$$\left[\hat{H}_k + \sum_{j, j \neq k} \int \psi_j^*(x_j) V_{jk} \psi_j(x_j) dx_j \right] \psi_k(x_k) - \sum_{j, j \neq k} \left(\int \psi_j^*(x_j) V_{jk} \psi_k(x_j) dx_j \right) \psi_j(x_k) = E_k \psi_k(x_k). \quad (89)$$

Теперь мы должны принять во внимание спин частиц. Мы игнорируем спин-орбитальное взаимодействие. Пусть n^\uparrow - число частиц со спином 0, 5 и n^\downarrow - частиц со спином $-0, 5$. Волновые функции этих частиц равны ψ_k^\uparrow и ψ_k^\downarrow . Тогда, в силу независимости V_{jk} от спиновой переменной, имеем

$$\int \psi_j^*(x_j) V_{jk} \psi_k(x_j) dx_j = \delta_{s_j s_k} \int \psi_j^{*s_j}(r_j) V_{jk} \psi_k^{s_k}(r_j) dr_j, \quad (90)$$

где $\delta_{s_j s_k}$ - символ Кронекера, индексы s_j, s_k принимают значения \uparrow, \downarrow .

В качестве потенциала взаимодействия мы используем дельта-потенциал: $V_{jk} = U\delta(r_j - r_k)$, где U - константа. Используя дельта-потенциал и (90), из (89) получаем следующую систему:

$$\begin{aligned} H_k \psi_j^\uparrow(r_k) + U \sum_j^{n^\downarrow} \left(\left| \psi_j^\downarrow(r_k) \right|^2 \psi_k^\uparrow(r_k) \right) &= E_k^\uparrow \psi_k^\uparrow(r_k), \quad (k = 1, \dots, n^\uparrow), \\ H_k \psi_j^\downarrow(r_k) + U \sum_j^{n^\uparrow} \left(\left| \psi_j^\uparrow(r_k) \right|^2 \psi_k^\downarrow(r_k) \right) &= E_k^\downarrow \psi_k^\downarrow(r_k), \quad (k = 1, \dots, n^\downarrow). \end{aligned} \quad (91)$$

Для решения системы мы использовали следующий итерационный алгоритм:

1. Найти одночастичные стационарные решения для случая потенциала $U_k = Fz_k$ и произвольно выбрать N решений в качестве начальных приближений для $\psi_i(x_i)$.
2. Для каждой частицы вычислить потенциал $P_i = U \sum_j \left| \psi_j(x_j) \right|^2$, где сумма включает частицы с противоположными спинами, а затем использовать ее для вычисления набора решений.
3. Для каждого из N множеств выбрать связанное состояние. (Здесь мы можем использовать произвольные дополнительные критерии, чтобы ускорить процесс).
4. Проверить, достаточно ли близки новые решения к предыдущим. Если нет, вернуться к шагу 2.

Положительный результат этого алгоритма является достаточным (с заданной точностью), но не необходимым условием существования решения. На шаге 2 мы выбираем решение из множества, которое минимизирует функционал $L_i(u) = \int_{\Omega} \left| u(x) \psi_i^{prev}(x) \right|^2 dx$, т.е. ближайший к предыдущему. Размеры множеств произвольны. Этот метод склонен к закликиванию между двумя наборами функций, которые дополняют друг друга. Чтобы избежать такого рода колебаний, формулу шага 2 может быть изменена: $U_i = \alpha U_i^{prev} + (1 - \alpha) U \sum_j \left| \psi_j(x_j) \right|^2$, где U_i^{prev} - значение потенциала на предыдущей итерации, а $\alpha \cong 0, 1$.

В результате мы можем получить многочастичные связанные состояния. На рисунке 24 приведен двумерный срез связанного состояния двух частиц с разными спинами. Здесь одна частица темная, а другая светлая.

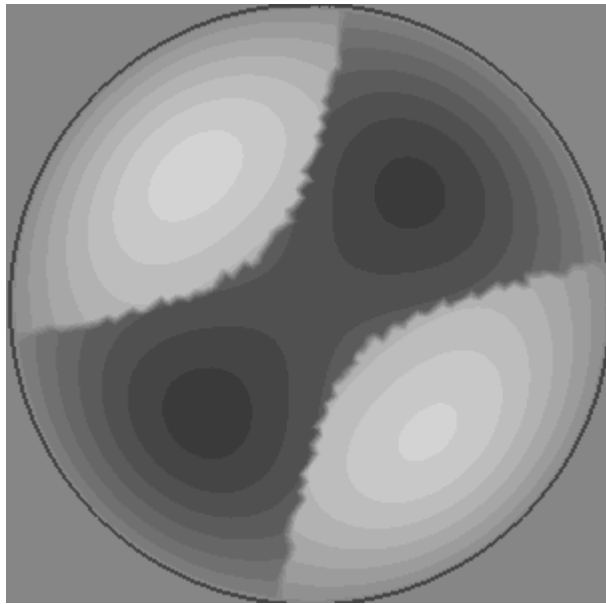


Рисунок 24 – Двухчастичное связанное состояние в срезе через плоскость отверстия

3.2.2 Основные результаты

Результаты данной секции опубликованы в [82, 83].

В этом разделе мы начинаем численное исследование зависимости дискретного спектра от основных параметров системы. Геометрия системы описана в начале главы, однако нужно отметить, что электрическое поле F здесь, в отличие от аналитической части, не симметрично относительно общей границы двух слоев, а имеет более физически-корректный вид: оно направлено вниз для обоих слоев. Мы рассматриваем случай одного круглого окна, с изменяющейся площадью (и эллиптического окна для последнего результата). Во всех расчетах мы используем произвольные единицы, с $\hbar = e = 1$, $m = 0.5$ (e, m - заряд и масса электрона, соответственно). Цвета энергетических уровней согласованы между всеми графиками этой секции. На всех графиках, черная линия (верхняя на каждом графике) представляет собой нижнюю границу существенного спектра.

Сначала мы исследуем зависимость дискретного спектра от площади окна, показанную на рисунке 25. Здесь напряженность поля фиксирована, $F = 5$ (что соответствует максимальному значению F на графике 26). Существенный спектр не зависит от параметров окна (теорема 3.1.1). Каждое связанное со-

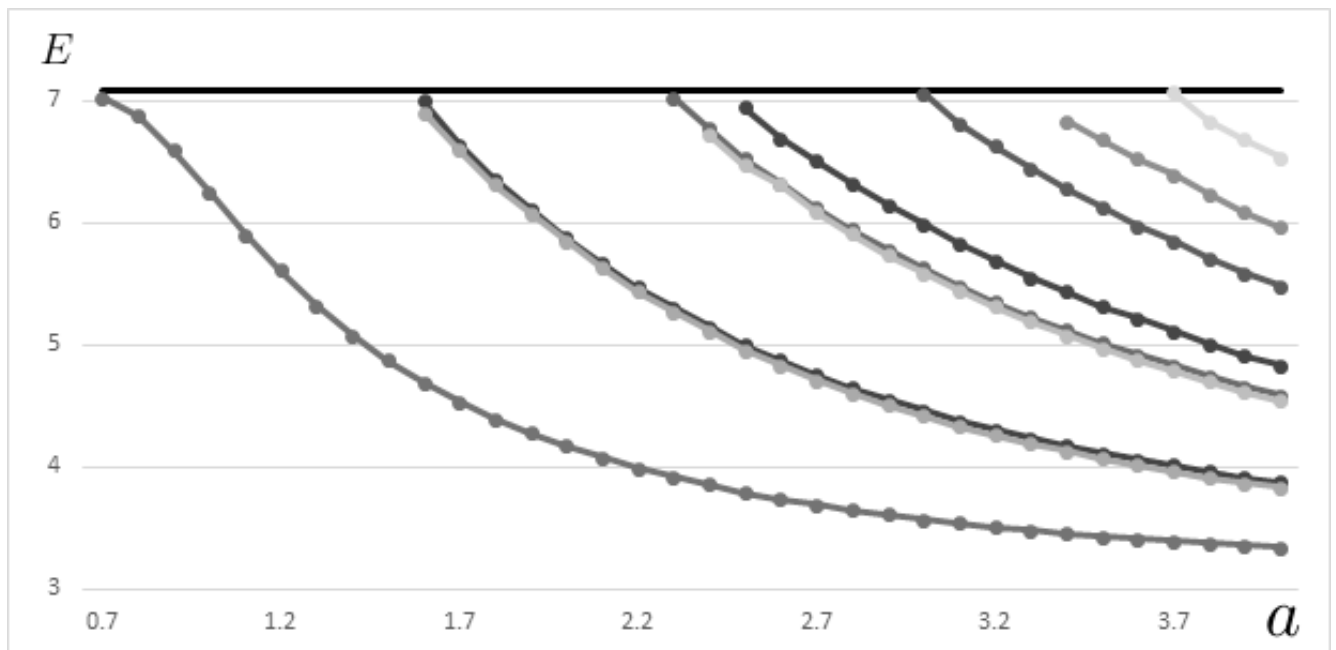


Рисунок 25 – Энергии связанных состояний, как функции от радиуса окна a . Напряженность электрического поля фиксирована $F = 5$.

стояние монотонно убывает как функция площади окна, а число связанных состояний возрастает. В соответствии с основной теоремой, первое граничное состояние находится ниже границы существенного спектра для всех положительных значений радиуса и сливается с границей существенного спектра при уменьшении радиуса до нуля.

Теперь исследуем зависимость спектра от напряженности электрического поля (рисунок 26). Радиус окна фиксирован, $a = 4$ (это максимальный радиус из рисунке 25). Электрическое поле не является локальным возмущением системы, поэтому оно изменяет как существенный спектр, так и дискретный. Оба спектра являются возрастающими функциями F , но граница существенного спектра растет быстрее, позволяя возникать большему количеству связанных состояний, по мере увеличения напряженности поля.

Отметим, что на графиках 25 и 26, значения параметров a и F совпадают на правой границе обоих графиков, то есть точки в самом правом столбце каждого из них соответствуют одним и тем же собственным состояниям системы (в частности, их энергии равны).

Естественно, возникает вопрос, какие параметры окна важны. В частности, как дискретный спектр зависит от площади, периметра и формы окна. Более подробно эти вопросы рассмотрены для аналогичной системы (та же гео-

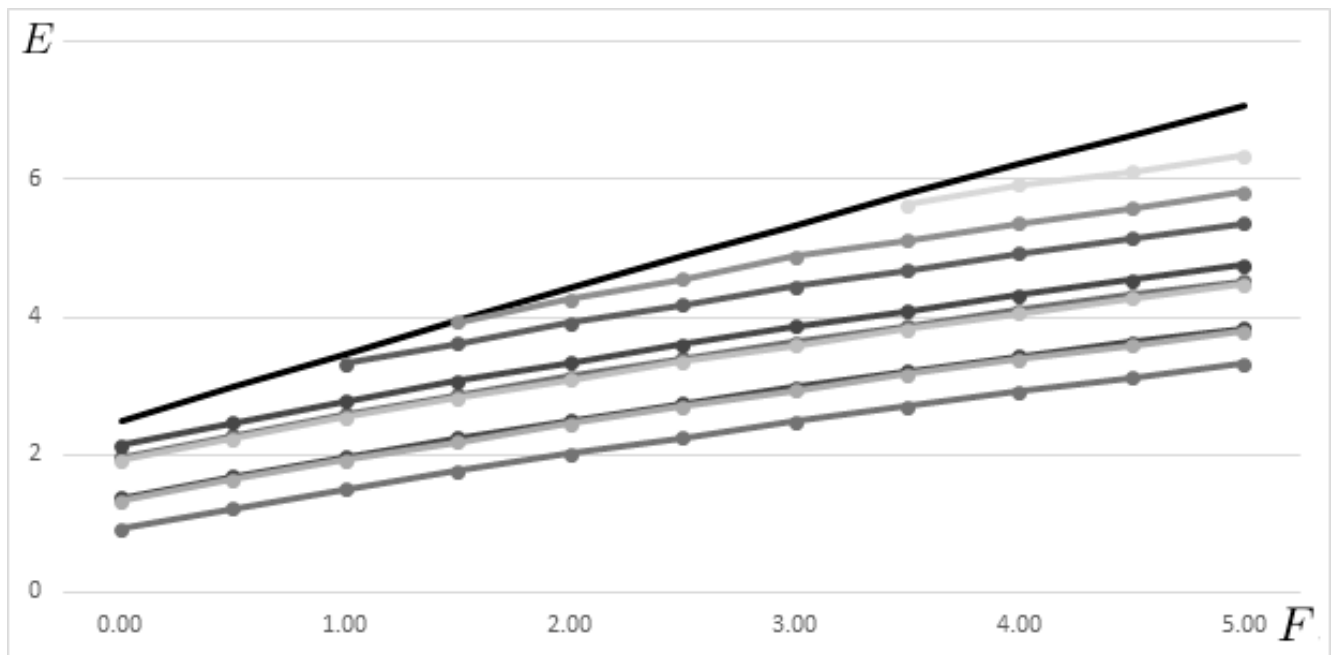


Рисунок 26 – Энергии связанных состояний как функции напряженности электрического поля F . Радиус окна фиксирован $a = 4$.

метрия, но отсутствует однородное электрическое поле) в секции 3.3. Здесь мы рассматриваем влияние формы окна, в частности, изменяем эксцентриситет эллиптического окна, отслеживая различные связанные состояния, см. рисунок 27. Площадь фиксирована и соответствует площади круга с $a = 4$. Напряженность поля фиксирована, $F = 5$. Здесь мы видим различную динамику для разных типов связанных состояний (более подробно о классификации см. в секции 3.3).

3.2.3 Дополнительные результаты

В данном пункте продолжается исследование проводящих слоев. В отличие от предыдущего пункта, в данном, внешнее электрическое поле не является однородным по отношению к обоим слоям, но зеркально отражается относительно плоскости, т.е. и для верхнего, и для нижнего слоя, при положительной интенсивности, оно направлено в разные стороны от их общей границы. Именно такое поле получается если моделировать второй слой с помощью условий Неймана на нижней границе первого, как это было сделано в первой части главы. Во-первых, мы построим сдвиг нижней границы существенного спектра в зависимости от напряженности приложенного электрического поля. Эти расчеты

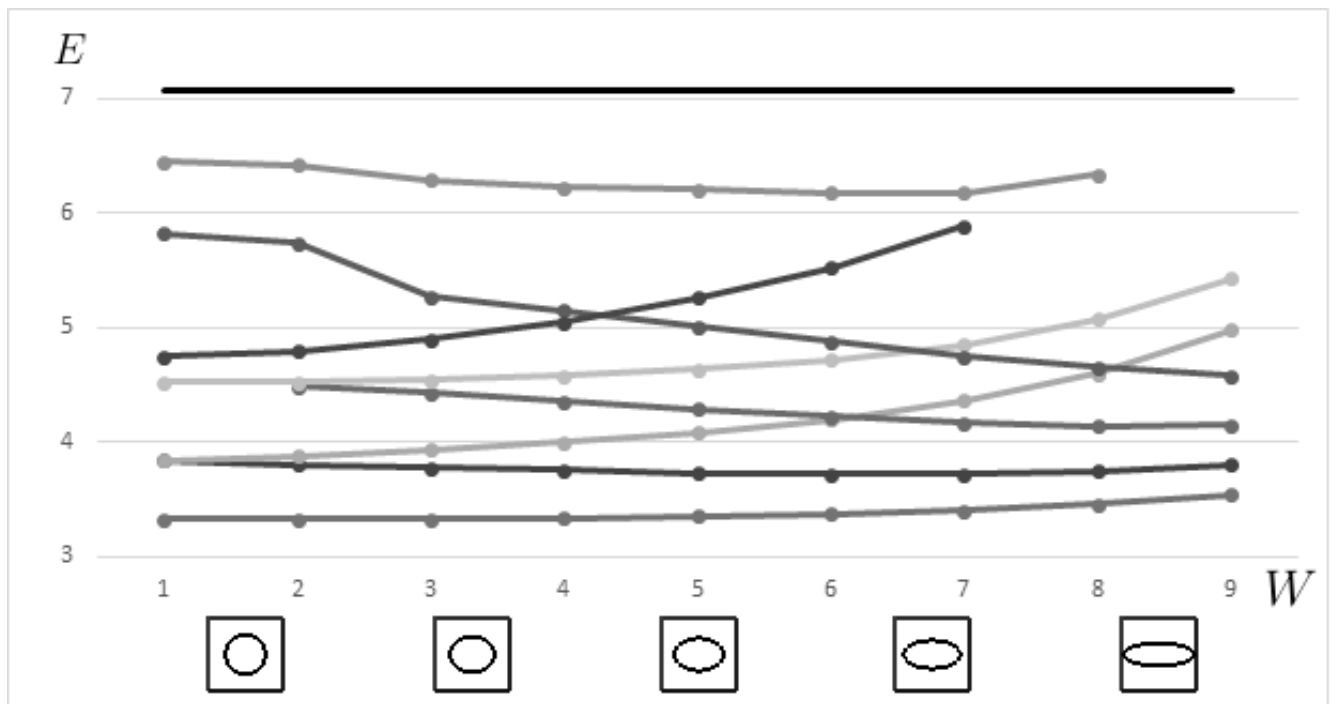


Рисунок 27 – Энергии связанных состояний, как функции расстояния между фокусами эллиптического окна. Площадь окна постоянна ($S = 16\pi$), напряженность электрического поля фиксирована $F = 5$.

проводятся для случая без окна. Этого достаточно в силу известной теоремы о том, что локальное возмущение, например окно, не изменяет существенный спектр. Результаты показаны на рисунке 28. В отсутствие электрического поля, $F = 0$, нижняя граница существенного спектра равна π^2 . Когда поле прикладывается, спектр смещается почти линейно с изменением F .

Затем мы проводим расчеты для различных значений напряженности электрического поля F и радиуса окна a и сравниваем собственные значения с пороговым значением для существенного спектра. Собственные значения ниже порогового значения, соответствуют дискретному спектру. Число возможных связанных состояний зависит как от интенсивности поля, так и от радиуса окна. На приведенном графике, (рисунок 29) минимальный радиус окна, допускающий 2, 3, 4 или 5 связанных состояний, показан как функция от напряженности электрического поля. При увеличении F частица отталкивается от границы раздела окон, и связанные состояния, которые были стабильны без электрического поля, могут быть разрушены.

Теперь мы можем вычислить минимальные радиусы, для которых связанные состояния все еще существуют (рисунок 30). На рисунке, разные графики

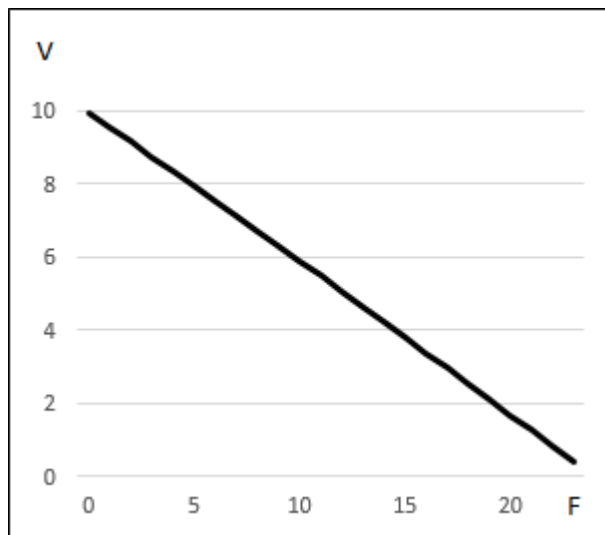


Рисунок 28 – Нижняя граница существенного спектра для одночастичного связанного состояния, в условных единицах.

соответствуют разным силам взаимодействия U , возрастающей от графика к графику линейно.

Аналогичные графики можно построить для частиц с одинаковым спином, но, как показывает (91), при дельта взаимодействии они не будут вносить вклад в потенциалы друг друга и просто занимают разные уровни системы из одной частицы, из рисунка 29, например, минимальные радиусы для трехчастичного состояния с одинаковым спином, соответствует линии $N = 3$ на рисунке 29.

3.3 Классификация связанных состояний проводящих слоев

3.3.1 Построения

В данной секции приводятся результаты нашей статьи [84]. Мы продолжаем изучение системы из двух проводящих слоев, соединенных через окна в общей границе. Теперь, в отличие от предыдущих секций, электрическое поле отсутствует $F = 0$, и внимание сосредоточено на форме окон.

Мы рассматриваем зависимость между формой окна и уровнями энергии собственных состояний системы, а также количеством зон знакопостоянства собственных функций. В соответствии с полученными уровнями энергии и фор-

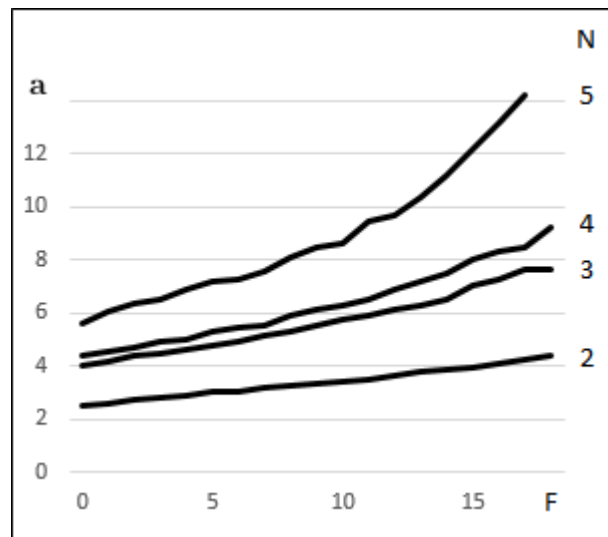


Рисунок 29 – Графики минимальных радиусов, для которых все еще существует N дискретных уровней ниже существенного спектра, для одночастичного связанного состояния. Номер графика, N , соответствует числу уровней ниже основного спектра: 2, 3, 4 и 5

мой численно полученных связанных состояний, предлагается классификация этих функций по количеству и расположению зон знакопостоянства. Особенностью выделенных классов является стабильная и уникальная для каждого класса зависимость уровня энергии от конкретных параметров формы отверстия.

Мы рассматриваем два типа окон: эллиптические окна и окна в форме овалов Кассини (в форме орехов арахиса), которые переходят в два отдельных круглых окна. Мы показываем зависимость энергии связанного состояния E от параметра W , который в случае овалов Кассини представляет собой расстояние между фокусами овалов, а для двух отверстий - расстояние между их центрами. Эллипсы выбраны так, чтобы соответствовать ширине овалов Кассини. Все окна имеют одинаковую площадь.

Сначала мы рассмотрим случай одной частицы. Если рассмотреть двумерный срез собственных функций через плоскость окна, то можно выделить несколько устойчивых типов решений, классифицированных по числу и положению зон знакопостоянства (nodal domains). Теорема Куранта о зонах знакопостоянства (nodal theorem) гласит, что для Лапласиана Дирихле число узловых доменов не может превышать индекс состояния в списке всех состояний, отсортированных по возрастанию собственных значений. В нашем случае мы

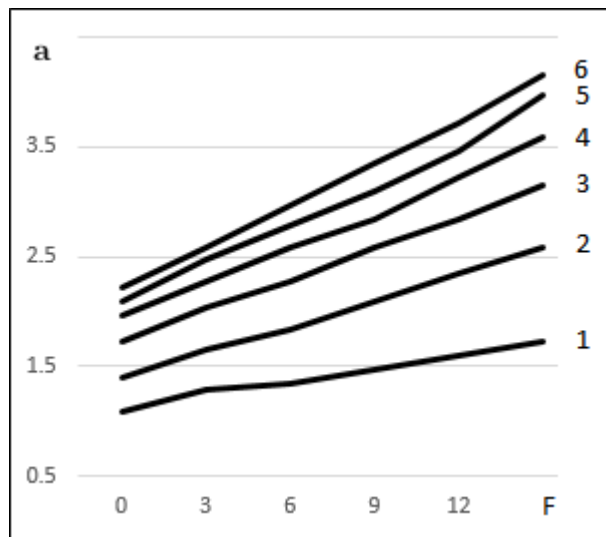


Рисунок 30 – Пограничные радиусы, для которых все еще существует двух-частичное (у частиц разные спины) связанное состояние, как функции от F . Разные графики соответствуют разной силе взаимодействия между частицами U , от 1 до 6 в произвольных единицах

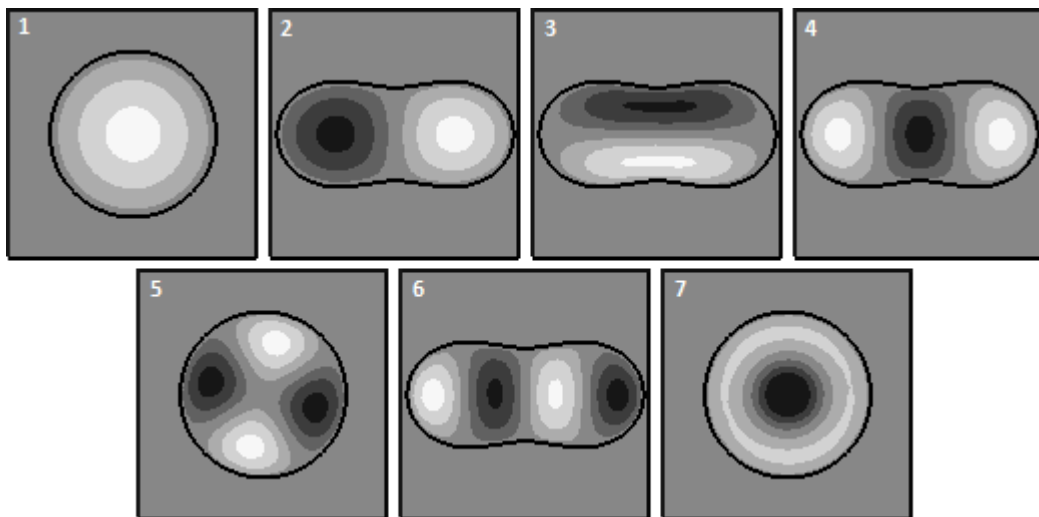


Рисунок 31 – Примеры типов связанных состояний, в виде двухмерного среза вдоль плоскости окна. Метки: 1-один, 2-два, 3-поперечная двойка, 4-три, 5-квадратная четверка, 6-четыре в ряд, 7-кольцо.

будем придерживаться первых семи типов, которые показаны на рисунке 31. Эти типы связанных состояний, с изменением параметра W демонстрируют стабильное поведение, а их энергии изменяются по-разному, в зависимости от геометрии типа (эллиптической или Кассини). Результаты для случаев эллиптического окна и окна в форме овалов Кассини показаны на рисунке 32.

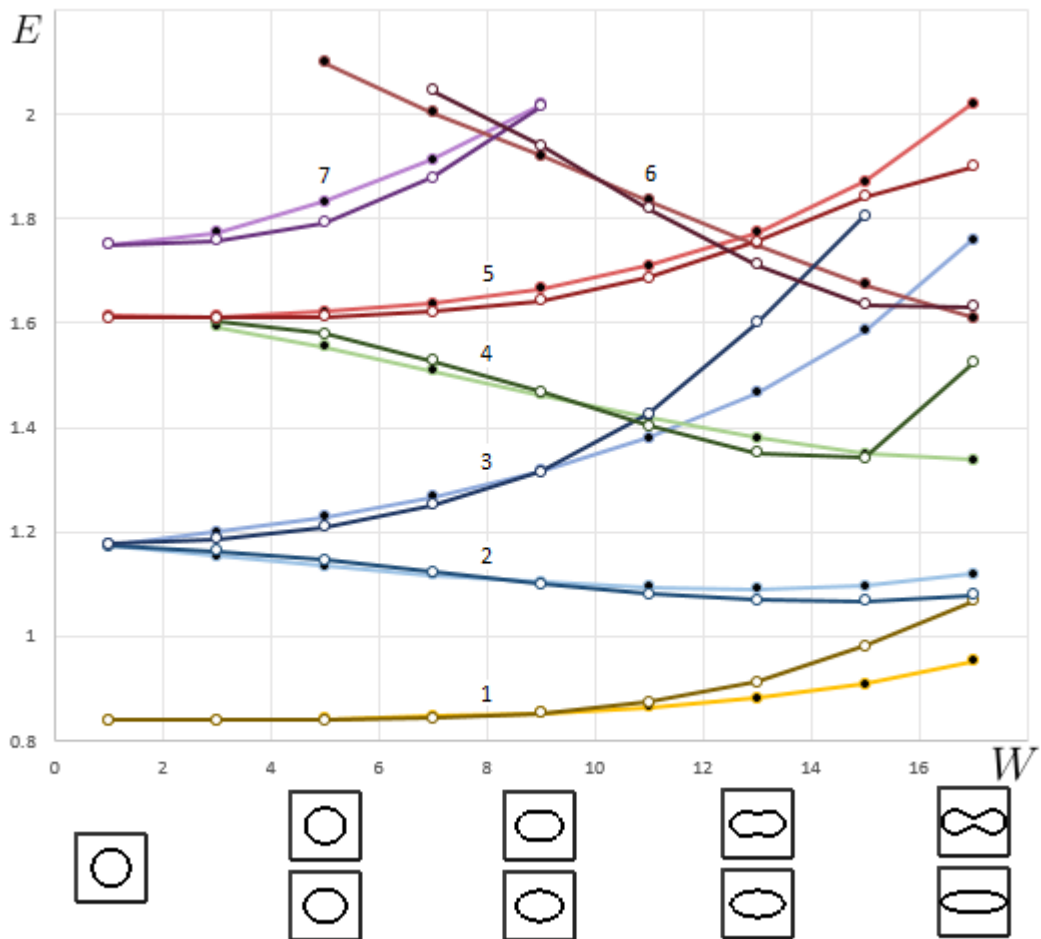


Рисунок 32 – Энергии различных одночастичных типов состояний как функции расстояния между центрами овалов Кассини. Тусклые линии, следующие за основными, представляют энергии состояний того же типа, но для эллиптического окна (той же ширины что и соответствующее эллиптическое окно). Все окна имеют одинаковую площадь. Типы обозначены в соответствии с приведенными на рисунке 31 классами. Формы окон показаны под осью W .

Как мы видим, для большинства типов уровни энергии стремятся в положительном направлении с увеличением деформации круглого окна, но для некоторых типов - наоборот, наблюдается уменьшение уровня энергии. Отметим некоторые особенности. Первые два состояния для овалов Кассини сходятся к одной и той же энергии, поскольку первое состояние превращается в копию второго, но с обоими пиками, направленными в одну сторону. На типы поперечная пара (3) и тройка (4), больше всего влияет изменение овалов Кассини в конце (энергия поперечной пары для последнего вида отверстий слишком высока и выпадает из приведенного диапазона), потому что их зона постоянного знака

находится в центре и деформируется закрывающимся зазором. При дальнейшем закрытии "моста тип (4) будет приближаться к типу (6), но, в соответствии с теоремой Куранта, не превысит его.

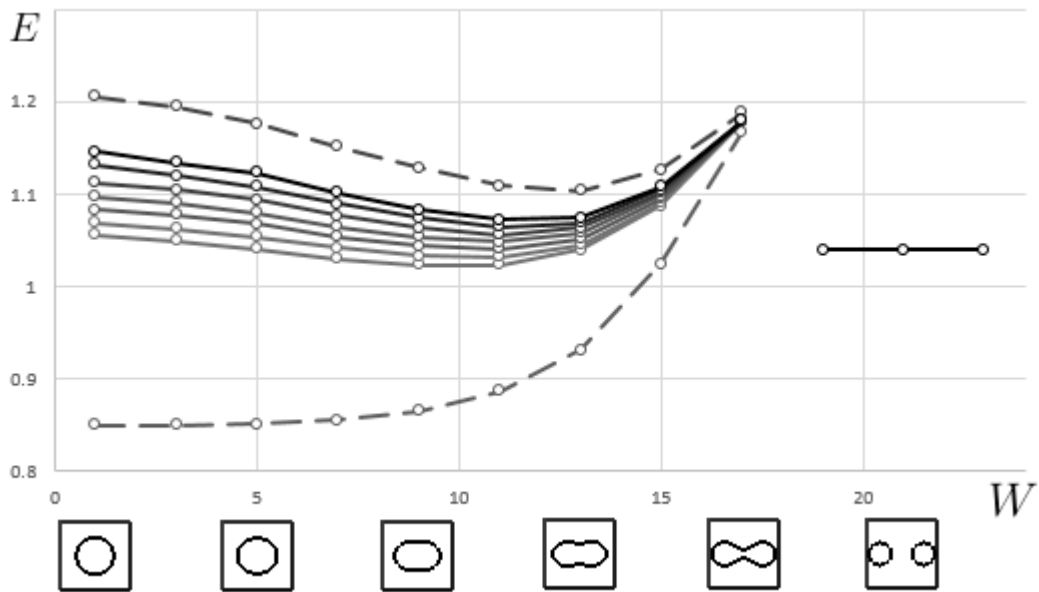


Рисунок 33 – Энергия первого связанного состояния для случая двух частиц. Пунктирные графики показывают первые два одночастичных типа для окон Кассини из рисунка 32, для сравнения. (Они немного отличаются от приведенных на другом графике из-за различия в заданной точности вычислений.) Серые линии представляют энергии каждой частицы в первых двухчастичных связанных состояниях, каждая линия соответствует различной силе дельта-взаимодействия. Используемые силы: 30, 50, 85, 140, 250, 500, 1000 от самой низкой до самой высокой линии соответственно. Для случая двух отдельных круговых отверстий все силы, естественно, имеют очень близкие энергии, построенные в правой части графика (последние три точки).

Для двухчастичной системы мы рассматриваем окно Кассини, и смотрим на самый низкий уровень энергии связанных состояний, для различных сил дельта-взаимодействия (см. рисунок 33), и сравниваем его с первыми двумя уровнями из рисунка 32. Мы также расширили деформацию окна, добавив три состояния с двумя круглыми окнами на конце. Для случая двух отверстий, различные силы имеют неразличимые в нашем масштабе уровни. График показывает, что с увеличением силы взаимодействия, совместные состояния пары частиц стремятся от первого, ко второму типу. Энергия для двух отверстий

почти не зависит от расстояния между ними (напомним, что геометрия системы все еще подразумевает взаимодействие между частицами в этом последнем случае - в верхнем и нижнем слоях, но не в плоскости между ними).

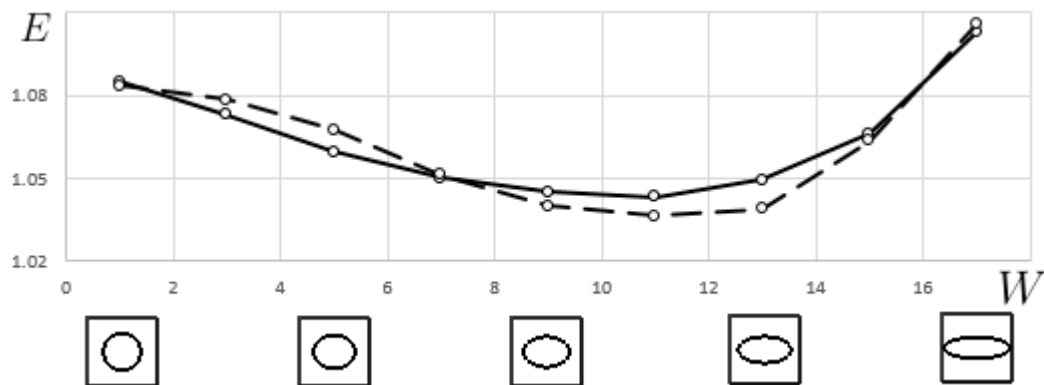


Рисунок 34 – Сравнение энергий связанных состояний пары частиц для эллиптического окна (сплошная линия) с соответствующими уровнями для окна Кассини (пунктирная линия).

На рисунке 34 мы сравниваем энергии эллиптических связанных состояний с энергиями Кассини для одинаковой силы взаимодействия. Графики для различных сил взаимодействия U между частицами, показывают те же отношения и поэтому не приводятся.

3.3.2 Выводы

Итак, мы рассмотрели квантовую систему из параллельных 3D слоев одинаковой ширины, соединенных через одно или несколько окон в ограниченной области, с симметричным внешним электрическим полем (рисунок 22). Для такой системы были доказаны стабильность непрерывного спектра и существование по крайней мере одного изолированного собственного значения, ниже существенного спектра, для любого размера окон.

Затем, численно, мы более детально исследовали ряд связанных состояний, и их конкретную зависимость от площади окна, различных интенсивностей внешнего поля и формы окна. Результаты показывают монотонный рост числа связанных состояний с увеличением площади или напряженности поля, для круглого окна. Для случая деформации формы окна связанные состояния образуют несколько различных типов, с устойчивым и предсказуемым поведением.

Далее, исследование сосредоточилось на форме окна, и была получена классификация связанных состояний системы по количеству и расположению зон знакопостоянства. Выведенные классы обладают уникальной реакцией на изменения формы отверстий, например, для типов состояний, у которых зона располагается в центре симметрии окна, энергия резко возрастает при деформациях окна, уменьшающих доступную площадь вокруг центра отверстия, в то время как влияние такой деформации на энергии "четных" типов незначительно.

Результаты предполагают, в качестве возможных направлений для дальнейшего исследования, создание более формальных способов описания предложенных типов связанных состояний и более строгий анализ зависимости уровней энергии типов от конкретных параметров формы окна.

3.4 Заключение

В работе был исследован ряд систем различной геометрии с сингулярными взаимодействиями. Мы начинаем с гофрированных двухмерных систем с дельта-подобным взаимодействием, вызванным чисто геометрическими возмущениями. Затем переходим на настоящий двухмерный дельта-потенциал на прямых, продолжаем с дельта-потенциалом на прямой в трехмерном пространстве, и, в завершении, приводим численное исследование трехмерных слоев с дельта-взаимодействием между частицами.

Результаты работы интересны с математической точки зрения, и содержат набор утверждений, расширяющих теорию линейных операторов. Также рассмотренные системы используются как модели ряда физических систем в различных областях физики: в акустике, наноэлектронике, молекулярной биологии и так далее. Мы рассматриваем важнейшую характеристику для таких моделей - спектр и собственные состояния системы и рассчитываем что результаты станут одной из ступеней развития научной мысли в данных областях.

Список литературы

- [1] Vorobiev, A. M. On formal asymptotic expansion of resonance for quantum waveguide with perforated semitransparent barrier [Text] / A.M. Vorobiev, A.S. Bagmutov, A.I. Popov // *Nanosys Phys Chem Math.* - 2019. - Vol.10(4). - P. 415–419.
- [2] Багмутов, А.С. Вольт-амперные характеристики для двух систем квантовых волноводов с присоединенными квантовыми резонаторами [Текст] / А.С. Багмутов, И.Ю. Попов // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики* - 2016. - Т. 16. - № 4(104). - С. 725-730.
- [3] Багмутов, А.С. Спектр лапласиана в области с границей и барьером, составленными из малых резонаторов [Текст] / А.С. Багмутов, И.Ю. Попов // *Математическая физика и компьютерное моделирование* - 2022. - Т. 25. - № 4. - С. 29-43.
- [4] Asymptotic Expansions of Resonances for Waveguides Coupled through Converging Windows [Text] / Трифанова Е.С., Багмутов А.С., Катасонов В.Г., Попов И.Ю. // *Челябинский физико-математический журнал [Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal]* - 2023. - Т. 8. - № 1. - С. 72-82
- [5] Trifanova, E.S. Resonator with a Corrugated Boundary: Numerical Results [Text] / E.S. Trifanova, A.S. Bagmutov, I.Yu. Popov // *Physics of Particles and Nuclei Letters* - 2023, Vol. 20, No. 2, P. 96-99
- [6] Courant, R. *Methods of Mathematical Physics* [Text] / R. Courant, D. Hilbert .- Vol. 1: Wiley-Interscience, New York, 1953.
- [7] Arrieta, J.M. Eigenvalue problems for non-smoothly perturbed domains [Text] / J.M. Arrieta, J.K. Hale, Q. Han // *J. Differential Equations* - 1991. - Vol.91. - P. 24–52.
- [8] Sanchez-Palencia, E. *Nonhomogeneous Media and Vibration Theory* [Text] / E. Sanchez-Palencia - Springer-Verlag, Berlin - New York, 1980.

- [9] Cardone, G. Neumann spectral problem in a domain with very corrugated boundary [Text] / Cardone G., Khrabustovskyi A. // J Differential Equations - 2015. - Vol.259(6). - P. 2333–2367.
- [10] Popov, I.Yu. A model of a boundary composed of the Helmholtz resonators [Text] / I.Yu. Popov, I. V. Blinova, A. I. Popov. // Complex Var. Elliptic Equ. - 2021. - Vol.66(8). - P. 1256-1263.
- [11] Borisov, D. Quantum waveguides with small periodic perturbations: gaps and edges of Brillouin zones [Text] / Borisov D., Pankrashkin K. // J Phys A. - 2013. - Vol.46(18). - P. 235203.
- [12] Cardone, G. A gap in the essential spectrum of a cylindrical waveguide with a periodic perturbation of the surface [Text] / Cardone G., Nazarov S., Perugia C. // Math Nachr. - 2010. - Vol.283. - P. 1222–1244.
- [13] On boundary value problem with singular inhomogeneity concentrated on the boundary [Text] / Chechkin G. A., Cioranescu D., Damlamian A. et al. // J Math Pures Appl. - 2012. - Vol.98. - P. 115–138.
- [14] Hempel, R. The essential spectrum of Neumann Laplacians on some bounded singular domains [Text] / Hempel R, Seco L, Simon B. // J Funct Anal. - 1991. - Vol.102. - P. 448–483.
- [15] Pavlov, B.S. Extensions theory and explicitly solvable models [Text] / Pavlov B.S. // Russian Math Surveys. - 1987. - Vol.42(6). - P. 127–168.
- [16] Popov, I.Yu. The extension theory and localization of resonances for the domain of trap type [Text] / Popov I.Yu. // Matematicheskii sbornik. - 1990. - Vol.181(10). - P. 1366-1390.
- [17] Popov, IYu. The resonator with narrow slit and the model based on the operator extensions theory [Text] / Popov IYu. // J Math Phys. - 1992. - Vol.33(11). - P. 3794–3801.
- [18] Popov, I.Yu. The extension theory and resonances for a quantum waveguide [Text] / Popov I.Yu., Popova S.L. // Phys Lett A. - 1993. - Vol.173. - P. 484–488.

- [19] Popov, I.Yu. Zero-width slit model and resonances in mesoscopic systems [Text] / Popov I.Yu., Popova S.L. // *Europhys Lett.* - 1993. - Vol.24(5). - P. 373–377.
- [20] Popov, I.Yu. Eigenvalues and bands imbedded in the continuous spectrum for a system of resonators and a waveguide: solvable model [Text] / Popov I.Yu., Popova S.L. // *Phys Lett A.* - 1996. - Vol.222. - P. 286–290.
- [21] Gugel, Yu.V. Hydrotron: creep and slip [Text] / Gugel Yu.V., Popov I.Yu., Popova S.L. // *Fluid Dynam Res.* - 1996. - Vol.18(4). - P. 199–210.
- [22] Melikhova A.S. Spectral problem for solvable model of bent nanopeapod [Text] / Melikhova A.S., Popov I.Y. // *Appl Anal.* - 2017. - Vol.96(2). - P. 215–224.
- [23] Gadyl'shin, R. R. Existence and asymptotics of poles with small imaginary part for the Helmholtz resonator [Text] / R. R. Gadyl'shin // *Russian Mathematical Surveys* - 1997. - Vol.52(1). - P. 1–72.
- [24] А.М.Ильин, Согласование асимптотических разложений решений краевых задач [Текст] / А.М.Ильин - М.: Наука - 1989. 336 с.
- [25] Trifanova, E.S. Resonance phenomena in curved quantum waveguides coupled via windows [Text] / E.S. Trifanova // *Techn. Phys. Lett.* - 2009. - Vol.35(2). - P. 180-182.
- [26] Borisov, D. Distant perturbation asymptotics in window-coupled waveguides. I. The nonthreshold case [Text] / D. Borisov, P. Exner. // *J. Math. Phys.* - 2006. - Vol.47(11). - P. 113502(1-24).
- [27] Khrabustovskyi, A. Homogenization of eigenvalue problem for Laplace-Beltrami operator on Riemannian manifold with complicated "bubble-like" microstructure [Text] / A. Khrabustovskyi // *Math. Methods Appl. Sci.* - 2009. - Vol.32. - P. 2123–2137.
- [28] Zangeneh-Nejad, F. Active times for acoustic metamaterials [Text] / Zangeneh-Nejad F., Fleury R. // *Rev Phys.* - 2019. - Vol.4. - P. 100031.

- [29] Mahesh, K. Helmholtz resonator based metamaterials for sound manipulation [Text] / K. Mahesh, R. S. Mini // J. Phys.: Conf. Ser. - 2019. - Vol.1355. - P. 012031.
- [30] Acoustic perfect absorbers via Helmholtz resonators with embedded apertures [Text] / S. Huang, X. Fang, X. Wang, et.al. // The Journal of the Acoustical Society of America - 2019. - Vol.145. - P. 254;
- [31] McCann, R.C. Highly Accurate Approximations of Green's and Neumann Functions on Rectangular Domains [Text] / R.C. McCann, R.D. Hazlett, D.K. Babu. // Proc. R. Soc. Lond. A - 2001. - Vol.457. - P. 767-772.
- [32] Birman, M.S. Spectral theory of self-adjoint operators in Hilbert space [Text] / Birman M.S., Solomyak M.Z. - Dordrecht: D. Reidel Publishing Company - 1986.
- [33] Behrndt, J. Elliptic boundary value problems with k -dependent boundary conditions [Text] / Behrndt J. // J Differential Equations. - 2010. - Vol.249. - P. 2663–2687.
- [34] Exner, P. Waveguides coupled through a semitransparent barrier: a Birman-Schwinger analysis [Text] / Exner P., Kreicirik D. // Rev. Math. Phys. - 2001. - Vol.13. - P. 307-334.
- [35] Behrndt, J. Boundary triples for Schrödinger operators with singular interactions on hypersurface [Text] / Behrndt J., Langer M., Lotoreichik V. // Nanosystems: Phys. Chem. Math. - 2016. - Vol.7(2). - P. 290-302.
- [36] Mantile, A. Laplacians with singular perturbations supported on hypersurfaces [Text] / Mantile A., Posilicano A. // Nanosystems: Phys. Chem. Math. - 2016. - Vol.7(2). - P. 315-323.
- [37] Exner, P. Asymptotics of the bound state induced by delta-interaction supported on a weakly deformed plane [Text] / Exner P., Kondej S., Lotoreichik V. // J. Math. Phys. - 2018. - Vol.59. - P. 013051.

- [38] Approximation of Schroedinger operators with delta-interactions supported on hypersurfaces [Text] / Behrndt J., Exner P., et.al. // Math. Nachr. - 2017. - Vol.290. - P. 1215-1248.
- [39] Popov, I.Yu. The operator extension theory, semitransparent surface and short range potential [Text] / Popov I.Yu. // Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. - 1995. - Vol.118. - P. 555-563.
- [40] Tikhonov, A.N. Equations of Mathematical Physics [Текст] / Tikhonov A.N., Samarskii A.A. - M.: Science - 1972. - P. 531.
- [41] Frolov, S.V. Resonances for laterally coupled quantum waveguides [Text] / Frolov S.V., Popov I.Yu. // J. Math. Phys. - 2000. - Vol.41. - P. 4391-4405.
- [42] Gadyl'shin, R.R. Surface potentials and the method of matching asymptotic expansions in the Helmholtz resonator problem [Text] / Gadyl'shin R.R. // Algebra i Analiz, 1992, 4(2), P. 88–115; translation in St. Petersburg Math. J. - 1993. - Vol.4(2). - P. 273-296.
- [43] Bagmutov, A.S. Bound states for laplacian perturbed by varying potential supported by line in R^3 [Text] / Bagmutov A.S. // Наносистемы: Физика, химия, математика = Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2021. - Vol. 12, No. 5. - P. 549-552.
- [44] Bagmutov, A.S. Bound states for two delta potentials supported on parallel lines on the plane [Text] / Bagmutov A.S., Popov I.Y. // Physics of Complex Systems - 2022, Vol. 3, No. 1, P. 37-42.
- [45] The electron transmission properties in a non-planar system of two chained rings [Text] / Smolkina M.O., Popov I.Y., Bagmutov A.S., Blinova I.V. // Journal of Physics: Conference Series - 2021, - Vol. 2086, No. 1. - P. 012211.
- [46] Approximation of Schroedinger operators with delta-interactions supported on hypersurfaces [Text] / Behrndt, J., Exner, P., Holzmann, M., Lotoreichik, V. // Mathematische Nachrichten - 2017. - Vol.290 (8–9). - P. 1215–1248.

- [47] Spectral theory for Schroedinger operators with δ -interactions supported on curves in R^3 [Text] / J. Behrndt, R.L. Frank, Ch. Kuhn, V. Lotoreichik, J. Rohleder // Ann. H. Poincar'e - 2017. - Vol.18. - P.1305–1347.
- [48] Behrndt, J. Boundary triples for Schrodinger operators with singular interactions on hypersurfaces [Text] / J. Behrndt, M. Langer, V. Lotoreichik, // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2016. - Vol.7 (2). - P. 290–302.
- [49] Schroedinger operator with singular interactions [Text] / Brasche J., Exner P., Kuperin Yu. A., Seba P. // Journal of Mathematical Analysis and Applications - 1994. - Vol.184 (1). - P. 112–139.
- [50] Brasche, J. Spectral analysis and scattering theory for Schrodinger operators with an interaction supported by a regular curve [Text] / Brasche, J., Teta, A. // Ideas and Methods in Quantum and Statistical Physics - 1992. Cambridge: Cambridge University Press. - P. 197–211.
- [51] Exner, P. Geometrically induced spectrum in curved leaky wires [Text] / P. Exner, T. Ichinose // Journal of Physics A: Mathematical and General - 2001. - Vol.34 (7). - P. 1439–1450.
- [52] Exner, P. Spectral asymptotics of a strong δ' interaction on a planar loop [Text] / P. Exner, M. Jex // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical - 2013. - Vol.46 (34). - P. 345201.
- [53] Exner, P. Curvature-induced bound states for a δ interaction supported by a curve in R^3 [Text] / P. Exner, S. Kondej // Annales Henri Poincaré - 2002. - Vol.3 (5). - P. 967–981.
- [54] Exner, P. Strong-coupling asymptotic expansion for Schroedinger operators with a singular interaction supported by a curve in R^3 [Text] / P. Exner, S. Kondej // Reviews in Mathematical Physics - 2004. - Vol.16 (5). - P. 559–582.
- [55] Exner, P. Scattering by local deformations of a straight leaky wire [Text] / P. Exner, S. Kondej // Journal of Physics A: Mathematical and General - 2005. - Vol.38 (22). - P. 4865–4874.

- [56] Exner, P. Gap asymptotics in a weakly bent leaky quantum wire [Text] / P. Exner, S. Kondej // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical - 2015. - Vol.48 (49). - P. 495301.
- [57] Exner, P. Asymptotics of the bound state induced by δ -interaction supported on a weakly deformed plane [Text] / P. Exner, S. Kondej, V. Lotoreichik // Journal of Mathematical Physics - 2018. - Vol.59 (1). - P. 013051.
- [58] Exner, P. Strong coupling asymptotics for a singular Schrodinger operator with an interaction supported by an open arc [Text] / P. Exner, K. Pankrashkin // Communications in Partial Differential Equations - 2014. - Vol.39 (2). - P. 193–212.
- [59] Exner, P. On the existence of bound states in asymmetric leaky wires [Text] / P. Exner, S. Vugalter // Journal of Mathematical Physics - 2016. - Vol.57 (2). - P. 022104.
- [60] Exner, P. Asymptotics of eigenvalues of the Schroedinger operator with a strong delta-interaction on a loop [Text] / P. Exner, K. Yoshitomi // Journal of Geometry and Physics - 2002. - Vol.41 (4). - P. 344–358.
- [61] Li, F. Structure, function, and evolution of coronavirus spike proteins [Text] / F. Li // Annual Review of Virology - 2016. - Vol.3. - P. 237–261.
- [62] Popov, I. Yu. The helmholtz resonator and the theory of operator extensions in a space with indefinite metric [Text] / I. Yu. Popov // Russian Academy of Sciences. Sbornik Mathematics - 1993. - Vol.75 (2). - P. 285–315.
- [63] Popov, I. Yu. The extension theory and the opening in semitransparent surface [Text] / I. Yu. Popov // Journal of Mathematical Physics - 1992. - Vol.33 (5). - P. 1685–1689.
- [64] Posilicano, A. A Krein-like formula for singular perturbations of self-adjoint operators and applications [Text] / A. Posilicano // Journal of Functional Analysis - 2001. - Vol.183 (1). - P. 109–147.

- [65] Posilicano, A. Boundary triples and weyl functions for singular perturbations of self-adjoint operators [Text] / A. Posilicano // Methods of Functional Analysis and Topology - 2004. - Vol.10 (2). - P. 57–63.
- [66] Structure of mouse coronavirus spike protein complexed with receptor reveals mechanism for viral entry [Text] / Shang, J., Wan, Y., Liu, C. et al. // PLOS Pathogens - 2020. - Vol.16 (3). - P. e1008392.
- [67] Vorobiev, A. M. Resonance asymptotics for a pair quantum waveguides with common semitransparent perforated wall [Text] / A. M. Vorobiev, E. S. Trifanova, I. Yu. Popov // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2020. - Vol.11 (6). - P. 619–627.
- [68] Solvable Models in Quantum Mechanics [Text] / S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, H. Holden.- Springer, Heidelberg - 1988.
- [69] Shondin, Yu. On the semiboundedness of delta-perturbations of the Laplacian on curves with angular points [Text] / Yu. Shondin // Theor. Math. Phys. - 1995. - Vol.105. - P. 1189–1200.
- [70] Behrndt, J. Boundary value problems for elliptic partial differential operators on bounded domains [Text] / J. Behrndt, M. Langer // J. Funct. Anal. - 2007. - Vol.243. - P. 536–565.
- [71] Behrndt, J. Schroedinger operators with δ and δ' -potentials supported on hypersurfaces [Text] / J. Behrndt, M. Langer, V. Lotoreichik // Ann. Henri Poincar'e - 2013. - Vol.14. - P. 385–423.
- [72] Exner, P. Leaky quantum graphs: a review [Text] / P. Exner // Analysis on Graphs and its Applications, Proc. Symp. Pure Math. - 2008. - Vol.77. - P. 523–564.
- [73] Exner, P. Spectra of soft ring graphs [Text] / P. Exner, M. Tater // Waves Random Media - 2003. - Vol.14. - P. S47-S60.
- [74] Exner, P. Hiatus perturbation for a singular Schrödinger operator with an interaction supported by a curve in \mathbb{R}^3 [Text] / P. Exner, S. Kondej // J. Math. Phys. - 2008. - Vol.49. - P. 032111.

- [75] Exner, P. Strong coupling asymptotics for Schrodinger operators with an interaction supported by an open arc in three dimensions [Text] / P. Exner, S. Kondej // Rep. Math. Phys. - 2016. - Vol.77. - P. 1-17.
- [76] Kurylev, Ya. Boundary conditions on curves for the three-dimensional Laplace operator [Text] / Ya. Kurylev // Journal of Soviet Mathematics - 1983. - Vol.22(1). - P. 1072-1082.
- [77] Blagovescenskii, A.S. A three-dimensional Laplace operator with a boundary condition on the real line [Text] / A.S.Blagovescenskii, K.K.Lavrent'ev // Vestn.Leningr.Univ., Math. Mekh. Astron. - 1977. No 1. - P. 9-15.
- [78] Reed, M. Methods of Modern Mathematical Physics.- Vol. IV. / M. Reed, B. Simon .- Analysis of Operators - Academic Press, New York - 1978.
- [79] Pavlov, B. S. Model of diffraction on an infinitely-narrow slit and the theory of extensions [Text] / B. S. Pavlov, I.Y. Popov // Vestnik Leningrad. Univ. Ser. Mat., Mekh., Astr. - 1983. No 4. - P. 36-44.
- [80] Transport properties of a biphenyl-based molecular junction system the electrode metal dependence [Text] / H. Kondo, J. Nara, H. Kino, N. Ohno // J. Phys.: Condens. Matter - 2009. - Vol. 21. - P. 064220
- [81] Smolkina, M. O. The spin-filtering properties in two coupled Rashba quantum rings [Text] / M. O. Smolkina, I. Y. Popov, I. V. Blinova // Journal of Physics: Conference Series - 2020. - Vol. 1697. - P. 012198
- [82] On the discrete spectrum of a quantum waveguide with Neumann windows in presence of exterior field [Text] / Bagmutov A.S., Najar H., Melikhov I.F., Попов I.Y. // Наносистемы: Физика, химия, математика = Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2022. - Vol. 13, No. 2. - P. 156-164
- [83] Numerical analysis of multi-particle states in coupled nano-layers in electric field [Text] / Попов I.Y., Bagmutov A.S., Melikhov I.F., Najar H. // AIP Conference Proceedings - 2020, - Vol. 2293. - P. 360006

- [84] Bagmutov, A.S. Window-coupled nanolayers: window shape influence on one-particle and two-particle eigenstates [Text] / A.S. Bagmutov, I.Y. Popov // Наносистемы: Физика, химия, математика = Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2020. - Vol. 11, No. 6. - P. 636-641
- [85] Bound states in weakly deformed strips and layers [Text] / D. Borisov, P. Exner, R. Gadyl'shin, D. Krejcirik // Annales Henri Poincare - 2001. - Vol.2, No. 3. - P. 553–572.
- [86] Bulla, W. Existence of bound states in quantum waveguides under weak conditions [Text] / W. Bulla, W. Renger // Lett. Math. Phys. - 1995. - Vol.35, No.1. - P. 1–12.
- [87] Duclos, P. Curvature-induced bound state in quantum waveguides in two and three dimensions [Text] / P. Duclos, P. Exner // Rev. Math. Phys. - 1995. - Vol.7, No. 1. - P. 73–102.
- [88] Duclos, P. Curvature-induced resonances in a two-dimensional Dirichlet tube [Text] / P. Duclos, P. Exner, P. Stovicek // Annales Henri Poincare - 1995. - Vol.62, No.1. - P. 81–101.
- [89] Chenaud, B. Geometrically induced discrete spectrum in curved tubes [Text] / B. Chenaud, P. Duclos, P. Freitas, D. Krejcirik // Diff. Geom. Appl. - 2005. - Vol.23, No. 2. - P. 95–105.
- [90] Exner, P. Bound States in a Locally Deformed Waveguide: The Critical Case [Text] / P. Exner, S. A. Vugalter // Lett. Math. Phys. - 1997. - Vol.39, No. 1. - P. 59–68.
- [91] Briet, Ph. Eigenvalue asymptotics in a twisted waveguide [Text] / Ph. Briet, H. Kovarik, G. Raikov, E. Soccorsi // Comm. PDE - 2009. - Vol. 34, No. 8. - P. 818–836.
- [92] Ekholm, T. A Hardy inequality in twisted waveguides [Text] / T. Ekholm, H. Kovarik, D. Krejcirik // Arch. Rat. Mech. Anal. - 2008. - Vol.188, No. 2. - P. 245–264.

- [93] Borisov, D. Spectrum of the magnetic Schrodinger operator in a waveguide with combined boundary conditions [Text] / D. Borisov, T. Ekholm, H. Kovarik // *Annales Henri Poincare* - 2005. - Vol.6, No. 2. - P. 327–342.
- [94] Ekholm, T. Stability of the magnetic Schrodinger operator in a waveguide [Text] / T. Ekholm, H. Kovarik // *Comm. PDE* - 2005. - Vol.30, No. 4. - P. 539–565.
- [95] Grushin, V. V. On the eigenvalues of finitely perturbed laplace operators in infinite cylindrical domains [Text] / V. V. Grushin // *Math. Notes* - 2004. - Vol.75, No. 3. - P. 331–340.
- [96] Borisov, D. Discrete spectrum of a pair of non-symmetric waveguides coupled by a window [Text] / D. Borisov // *Sbornik Mathematics* - 2006. - Vol. 197. No. 4. - P. 475-504.
- [97] Borisov, D. Distant perturbation asymptotics in window-coupled waveguides. I. The non-threshold case [Text] / D. Borisov, P. Exner // *J. Math. Phys.* - 2006. - Vol.47, No. 11. - P. 113502-1 – 113502-24.
- [98] Borisov, D. Geometric coupling thresholds in a two-dimensional strip [Text] / D. Borisov, P. Exner, R. Gadyl'shin // *Journal of Mathematical Physics.* - 2002. - Vol.43, No. 12. - P. 6265-6278.
- [99] Weakly coupled bound states in quantum waveguides [Text] / W. Bulla, F. Gesztesy, W. Renger, B. Simon // *Proc. Amer. Math. Soc.* - 1997. - Vol.125, No. 5. - P. 1487-1495.
- [100] Bound states and scattering in quantum waveguides coupled laterally through a boundary window [Text] / P. Exner, P. Seba, M. Tater, D. Vanek // *J. Math. Phys.* - 1996. - Vol.37, No. 10. - P. 4867-4887.
- [101] Exner, P. Bound-state asymptotic estimate for window-coupled Dirichlet strips and layers [Text] / P. Exner, S. Vugalter // *J. Phys. A.* - 1997. - Vol.30, No. 22. - P. 7863-7878.
- [102] Gadyl'shin, R. On regular and singular perturbation of acoustic and quantum waveguides [Text] / R. Gadyl'shin // *Comptes Rendus Mechanique.* - 2004. - Vol.332, No. 8. - P. 647-652.

- [103] Popov, I. Yu. Asymptotics of bound states and bands for laterally coupled waveguides and layers [Text] / I. Yu. Popov // J. Math. Phys. - 2002. - Vol. 43, No. 1. - P. 215-234.
- [104] Borisov, D. On the spectrum of two quantum layers coupled by a window [Text] / D. Borisov // J. Phys. A: Math. Theor. - 2007. - Vol.40, No. 19. - P. 5045–5066.
- [105] Linde, H. Geometrically induced two-particle binding in a waveguide [Text] / H. Linde // J. Phys. A: Math. Gen. - 2006. - Vol.39 (18). - P. 5105-5114.
- [106] Popov, S. I. Two interacting particles in deformed nanolayer: discrete spectrum and particle storage [Text] / S. I. Popov, M. I. Gavrilov, and I. Yu. Popov // Phys. Scripta. - 2012. - Vol.86(3). - P. 035003.
- [107] Melikhov, I. F. Hartree-Fock approximation for the problem of particle storage in deformed nanolayer [Text] / I. F. Melikhov, I. Yu. Popov // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics - 2013. - Vol.4(4). - P. 559-563.
- [108] Calogero, F. Comparison between the exact and Hartree solutions of a one-dimensional many-body problem [Text] / F. Calogero, A. Degasperis // Phys. Rev. A - 1975. - Vol.11(1). - P. 265-269.
- [109] The Number of Nodal Domains on Quantum Graphs as a Stability Index of Graph Partitions [Text] / Band, R., Berkolaiko, G., Raz, H. et al. // Commun. Math. Phys. - 2012. - Vol.311. - P. 815–838. <https://doi.org/10.1007/s00220-011-1384-9>
- [110] Band, R. Nodal domains on graphs—how to count them and why? In Analysis on graphs and its applications [Text] / R. Band, I. Oren, U. Smilansky // volume 77 of Proc. Sympos. Pure Math., Providence, RI: Amer. Math. Soc. - 2008. - P. 5–27
- [111] Helffer, B. On nodal domains in Euclidean balls [Text] / B. Helffer, M. - P. Sundqvist, // Proc. Amer. Math. Soc. - 2016. - Vol.144(11). - P. 4777–4791

- [112] Melikhov, I. F. Multi-Particle Bound States in Window-Coupled 2D Quantum Waveguides [Text] / I. F. Melikhov, I. Yu. Popov // Chin. J. Phys. - 2015. - Vol.53. - P. 060802.
- [113] Popov, I. Yu. Asymptotics of bound states and bands for laterally coupled three-dimensional waveguides [Text] / I. Yu. Popov // Rep. on Math. Phys. - 2001. - Vol.48(3). - P. 277-288.
- [114] Popov, I. Yu. Asymptotics of bound state for laterally coupled waveguides [Text] / I. Yu. Popov // Rep. on Math. Phys. - 1999. - Vol.43(3). - P. 427-437.
- [115] Exner, P. A Quantum Pipette [Text] / P. Exner // J. Phys A: Math and General - 1995. - Vol.28, No. 18. - P. 5323-5330.
- [116] Najjar, H. A quantum waveguide with Aharonov-Bohm Magnetic Field [Text] / H. Najjar and M. Raissi // Math. Meth. App. Sci - 2016. - Vol.39, No. 1. - P. 92-103.
- [117] Messiah, A., Quantum Mechanics [Text] .- V. 2. / A. Messiah : North Holland Publishing Company, Amsterdam - 1965.