Український математичний вісник
Том 6 **(2009)**, № 2, 173 – 207

Точні моделі для операторів Шредінґера з δ'-подібними потенціалами

Юрій Д. Головатий, Степан С. Манько

(*Представлена М. М. Маламудом*)

Анотація. У статті розглядається відома проблема трактування одновимірного оператора Шредінґера із псевдопотенціалом $\alpha\delta'(x)$, де $\delta(x)$ — функція Дірака. Доведено, що в класичному формулюванні ця проблема містить приховані параметри, а тому не має однозначного розв'язку. Для широкого класу гамільтоніанів із локальним збуренням потенціалу вигляду $\alpha\varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)$ побудовано адекватні точні моделі та доведено апроксимаційні теореми. Введено поняття резонансної множини Σ_Ψ та функції зв'язку $\theta_\Psi\colon \Sigma_\Psi \to \mathbb{R}$, які є спектральними характеристиками профілю збурення Ψ і через які визначаються самоспряжені оператори точних моделей.

2000 MSC. 34L40, 34B09, 81Q10.

Ключові слова та фрази. Оператор Шредінґера, точкові взаємодії, псевдопотенціал, δ'-потенціал, точні моделі, простір Крейна, самоспряжене розширення, асимптотика.

Вступ

Стаття присвячена моделям квантової механіки, атомної фізики, акустики, де виникають одновимірні оператори Шредінґера з сингулярними потенціалами, а саме, потенціалами, зосередженими на дискретній множині точок. Такі моделі часто називають *точними*, бо резольвенти відповідних операторів будуються явно, що дозволяє обчислити спектри та коефіцієнти розсіяння. Основною проблемою є надання диференціальним операторам із узагальненими функціями в коефіцієнтах строгого математичного змісту. Простір розподілів $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ не є алгеброю, тому знаходження самоспряженого оператора, який адекватно описує фізичну модель, є досить непростою задачею. Історію дослідження одновимірних операторів Шредінґера з точковими взаємодіями можна знайти в додатку до книги [1], написаному

Стаття надійшла в редакцію 4.02.2009

ISSN 1810 – 3200.

P. Exner'ом, та додатку A (Historical remarks) в [3]. Ці монографії також містять достатньо повну бібліографію.

Всі фізичні величини, які можна спостерігати в квантово-механічних системах, описують самоспряженими операторами в гільбертовому просторі. Тому точні моделі, починаючи з піонерської роботи Ф. Березіна та Л. Фадєєва [8], вивчали в рамках теорії самоспряжених розширень симетричних операторів. Зазвичай, симетричні оператори в фізичних моделях пов'язані з диференціальними виразами. При цьому виникає проблема конструктивного опису самоспряжених розширень у термінах крайових умов. Для звичайних диференціальних операторів цю проблему розв'язав М. Г. Крейн [7, 15].

Для рівнянь з частинними похідними чи диференціально-операторних рівнянь проблема ускладнюється через нескінченні індекси дефекту симетричних операторів. У цій ситуації ефективнішим є метод абстрактних граничних умов [23, 24]. Поняття абстрактних граничних трійок, як узагальнення другої формули Ґріна, безпосередньо пов'язане з узагальненням функції Вейля на випадок довільного симетричного оператора з нескінченними індексами дефекту [16, 17]. За допомогою функцій Вейля можна описати спектри і резольвентні множини самоспряжених розширень, а також матриці розсіювання [9]. Техніка граничних трійок ефективно працює і в задачах з точковими взаємодіями [22, 36–38].

Дослідженню сингулярних збурень скінченного рангу присвячені роботи [2, 39, 40, 46] та книга [41]. Оператори Шредінґера та Штурма–Ліувілля із сингулярними потенціалами різного вигляду вивчалися в [31, 45, 47, 53–55].

Методами теорії самоспряжених розширень зазвичай можна отримати достатньо багату сім'ю операторів, формально пов'язану з диференціальним оператором із сингулярним потенціалом. Проте лише один з цих операторів має фізичне підґрунтя і адекватно описує модель. Дослідники часто вибирають його, послуговуючись деякими евристичними міркуваннями та фізичною інтуїцією, що породжує довгі наукові дискусії. Для деяких фізичних моделей не вдається знайти "правильний" оператор, не вийшовши за межі теорії самоспряжених розширень. Причиною є приховані параметри моделі. Якщо сингулярний потенціал замінити послідовністю гладких функцій, яка збігається до нього в топології розподілів, то отриманий асимптотичними методами граничний оператор залежатиме від характеру регуляризації — профілю апроксимуючої послідовності. Цей профіль і відіграє роль прихованого параметру. Вибір самоспряженого розширення у точній моделі теж залежатиме від форми потенціалу локальної дії в реальній фізичній моделі.

Задачі для диференціальних операторів із сингулярними коефіцієнтами, які є чутливими до способу їхньої регуляризації, можна досліджувати в рамках нових теорій узагальнених функцій [12, 28]. Там не лише коректно визначене множення, але й існує достатній запас “δ-функцій з фіксованим профілем” як різних елементів алгебри. Такий підхід до вивчення точних моделей використовували в [5,6]. Ці теорії є зручною мовою для формулювання результатів та опису доведень, проте в основі досліджень лежить класичний асимптотичний аналіз.

1. Формулювання задачі та основні результати

1.1. Формулювання задачі

У цій роботі ми повертаємося до старої проблеми трактування одновимірного оператора Шредінґера з δ'-потенціалом. Робимо ще одну спробу як фізично, так і математично вмотивовано ідентифікувати самоспряжені оператори, які “в першому наближенні” найкраще описують цей фізичний феномен.

Розглянемо формальний гамільтоніан

$$H_\alpha = -\frac{d^2}{dx^2} + U(x) + \alpha\delta'(x), \qquad x \in \mathbb{R},$$

де U — дійснозначна гладка функція, δ' — похідна функції Дірака, α — дійсна стала. Якщо добуток $\delta'(x)y(x)$ розуміти як $y(0)\delta'(x) - y'(0)\delta(x)$, то при $\alpha \neq 0$ рівняння $H_\alpha y = \lambda y$ не має жодного розв'язку в $\mathcal{D}'(\mathbb{R})$, окрім нульового. Щоб надати сенс оператору H_α, треба спершу побудувати самоспряжені розширення в $L_2(\mathbb{R})$ симетричного оператора

$$L = -\frac{d^2}{dx^2} + U(x), \qquad \mathcal{D}(L) = \{f \in C_0^\infty(\mathbb{R})\colon f(0) = f'(0) = 0\},$$

а далі одне з них оголосити оператором Шредінґера з потенціалом $U(x) + \alpha\delta'(x)$. Єдиної думки щодо правильного вибору такого оператора в науковій літературі немає, тому що L має достатньо багато самоспряжених розширень. У розділі 4 ми детально опишемо історію проблеми, проаналізуємо і порівняємо результати попередників.

Природно спершу розглянути реалістичнішу фізичну модель, а саме, сім'ю гамільтоніанів з гладкими потенціалами, які апроксимують сингулярний потенціал $\alpha\delta'(x)$. А далі вивчити асимптотичну поведінку цієї сім'ї. Нехай оператори $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$ є замиканням в $L_2(\mathbb{R})$

істотно самоспряжених операторів [10, с. 50]

$$H_\varepsilon(\alpha,\Psi)=-\frac{d^2}{dx^2}+U(x)+\frac{\alpha}{\varepsilon^2}\Psi(\varepsilon^{-1}x),\quad \mathcal{D}(H_\varepsilon(\alpha,\Psi))=C_0^\infty(\mathbb{R}).$$

Тут ε — малий додатний параметр. Функцію $\Psi\in C_0^\infty(\mathbb{R})$ називатимемо *профілем* локального збурення, а число α — *сталою зв'язку*. Зрозуміло, що для деяких профілів послідовність $\varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)$ збігається до $\delta'(x)$ в $\mathcal{D}'(\mathbb{R})$. Позначимо через $\mathcal{E}(L)$ множину всіх самоспряжених розширень оператора L і через $\mathcal{P}$ множину таких дійсних функцій $\Psi\in C_0^\infty(\mathbb{R})$, що $\operatorname{supp}\Psi=[-1,1]$. Припустимо, що потенціал $U(x)$ росте при $|x|\to\infty$.

Мета статті — побудова відображення $\mathbb{R}\times\mathcal{P}\longrightarrow\mathcal{E}(L)$, яке кожній парі (α,Ψ) ставить у відповідність самоспряжене розширення $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$ оператора L. Вибір оператора ґрунтується на близькості енергетичних рівнів та чистих станів гамільтоніанів із гладким та сингулярним потенціалами. Поведінка потенціалу U на нескінченності забезпечує дискретність спектру операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$, тому ми шукаємо асимптотику їхніх власних значень та власних функцій при $\varepsilon\to0$, а граничний оператор оголошуємо оператором $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$.

1.2. Структура статті

У розділі 2 вивчається якісна поведінка дискретного спектру збурених операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$. Доведено, що всі власні значення є неперервними, обмеженими зверху функціями малого параметрами ε. Проте спектр цієї сім'ї операторів, взагалі кажучи, є необмеженим знизу. Для багатьох профілів Ψ та $\alpha\neq0$ може існувати скінченна кількість власних значень, які прямують до $-\infty$ при $\varepsilon\to0$. Множину власних значень операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$, які при $\varepsilon\to0$ залишаються обмеженими знизу, ми називатимемо *скінченним спектром.*

У розділі 3 побудовані головні члени асимптотичних розвинень власних значень скінченного спектру та відповідних власних функцій. На формальному рівні отримані граничні оператори $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$, які належать множині $\mathcal{E}(L)$ при всіх $(\alpha,\Psi)\in\mathbb{R}\times\mathcal{P}$. Введено дві спектральні характеристики профілю Ψ, а саме, *резонансну множину* Σ_Ψ, яка є спектром задачі Штурма–Ліувілля $-w''+\alpha\Psi w=0$, $w'(-1)=0$, $w'(1)=0$ на інтервалі $(-1,1)$ стосовно спектрального параметра α, а також *функцію зв'язку* $\theta_\Psi\colon\Sigma_\Psi\to\mathbb{R}$. Значення цієї функції обчислюються за формулою $\theta_\Psi(\alpha)=w_\alpha(1)\big(w_\alpha(-1)\big)^{-1}$, де w_α — власна функція, що відповідає власному значенню $\alpha\in\Sigma_\Psi$. Якщо стала зв'язка не належить резонансній множині, то $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$ є прямою сумою операторів Шредінґера на півосях з потенціалом U та умовами Діріхле в нулі. Коли ж $\alpha \in \Sigma_\Psi$, то $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$ є замиканням істотно самоспряженого оператора $H(\alpha,\Psi) = -\frac{d^2}{dx^2} + U$ з областю визначення $\mathcal{D}(H(\alpha,\Psi)) = \{f \in C_0^\infty(\mathbb{R})\colon f(+0) = \theta_\Psi(\alpha) f(-0),\ \theta_\Psi(\alpha) f'(+0) = f'(-0)\}$.

У п'ятому розділі ми порівнюємо отриманий результат з результатами попередників, які досліджували точні моделі з δ'-взаємодією та δ'-потенціалом. Тут також наводимо приклади двох моделей з кусково сталим δ'-подібним потенціалом, в яких явно будуються резонансна множина та функція зв'язку. В задачі проходження крізь δ'-подібний бар'єр отримана формула граничного значення коефіцієнта проходження через θ_Ψ, а також показано, що резонансна множина суттєво впливає і на граничну поведінку спектру задачі Штурма–Ліувілля з δ'-подібним потенціалом.

У розділі 5 побудовані коректори асимптотичних розвинень власних значень та власних функцій операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$, бо головних членів, отриманих в розділі 3, недостатньо, щоб довести апроксимаційні теореми.

Основний результат статті міститься в розділі 6, де доведена збіжність власних значень скінченного спектру операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$ до власних значень оператора $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$, а також збіжність в $L_2(\mathbb{R})$ відповідних власних функцій.

2. Спектр операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$ та деякі допоміжні факти

Спершу опишемо множину $\mathcal{E}(L)$ всіх самоспряжених розширень мінімального оператора L, в якій ми шукатимемо оператори $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$. Оператор $L^* = -\frac{d^2}{dx^2} + U(x)$, $\mathcal{D}(L^*) = \{v \in W_2^2(\mathbb{R}\setminus 0)\colon -v'' + Uv \in L_2(\mathbb{R})\}$, є спряженим в $L_2(\mathbb{R})$ до оператора L^*.

Лема 2.1. *Кожен елемент множини $\mathcal{E}(L)$ є звуження оператора L^* на клас функцій, які у початку координат задовольняють один з двох типів крайових умов:*

$$h_1^- v'(-0) = h_2^- v(-0), \qquad h_1^+ v'(+0) = h_2^+ v(+0), \tag{2.1}$$

де $(h_1^\pm, h_2^\pm)$ трактуємо як точки проективної прямої $\mathbb{P}^1$; або ж

$$\begin{pmatrix} v(+0) \\ v'(+0) \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} v(-0) \\ v'(-0) \end{pmatrix}, \qquad C = e^{i\varphi} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}, \tag{2.2}$$

де $\varphi \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$, $c_{kl} \in \mathbb{R}$ та $c_{11}c_{22} - c_{12}c_{21} = 1$.

У випадку нульового потенціалу U лема доведена в [11, 50]. Зрозуміло, що гладкий потенціал не впливає на вигляд крайових умов у точці $x = 0$. Розширення, що відповідають крайовим умовам (2.1), називаються *незв'язаними* (*separated extensions*). Вони є прямою сумою двох самоспряжених операторів на півосях. Умовам спряження (2.2) відповідають, так звані, *зв'язані* розширення (*connected extensions*).

Нехай $\Psi_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)$, а $m_k(f) = \int_{\mathbb{R}} \xi^k f(\xi)\, d\xi$ — моменти функції f.

Лема 2.2. *Нехай $\Psi \in \mathcal{P}$, а c – ненульова стала. Послідовність Ψ_ε збігається при $\varepsilon \to 0$ до $c\delta'(x)$ в сенсі узагальнених функцій тоді і лише тоді, коли*

$$m_0(\Psi) = 0, \quad m_1(\Psi) \neq 0. \tag{2.3}$$

Крім того, $c = -m_1(\Psi)$.

Доведення. Оскільки для $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ при $\varepsilon \to 0$ маємо

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_\varepsilon, \varphi \rangle = \varepsilon^{-2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \Psi(\varepsilon^{-1}x)\varphi(x)\, dx = \varepsilon^{-1} \int_{-1}^{1} \Psi(\xi)\varphi(\varepsilon\xi)\, d\xi \\
= \varepsilon^{-1} \int_{-1}^{1} \Psi(\xi)\big(\varphi(0) + \varepsilon\varphi'(0)\xi + O(\varepsilon^2)\big)\, d\xi \\
= \varepsilon^{-1} m_0(\Psi)\varphi(0) + m_1(\Psi)\varphi'(0) + O(\varepsilon),
\end{aligned}$$

то послідовність $\langle \Psi_\varepsilon, \varphi \rangle$ має скінченну границю для всіх $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ лише тоді, коли $m_0(\Psi) = 0$. Якщо $m_1(\Psi) \neq 0$, то граничний функціонал $\langle \Psi_0, \varphi \rangle = m_1(\Psi)\varphi'(0)$ є нетривіальним і $\Psi_0 = -m_1(\Psi)\delta'(x)$. □

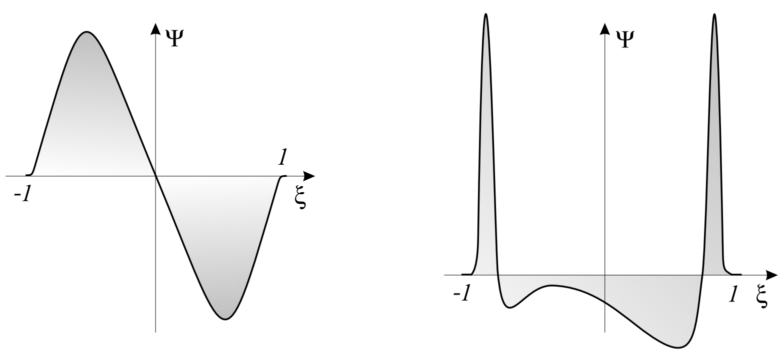

Рис. 1: δ'-подібні профілі

Перша з умов (2.3) вимагає знакозмінності потенціалу Ψ, а друга — його "асиметричності". Зокрема, якщо $\Psi(\xi)$ задовольняє (2.3), то функція $\Psi(\xi - a)$ не може бути парною для жодного a. Введемо позначення для множини *δ'-подібних профілів*

$$\mathcal{P}_0 = \{\Psi \in \mathcal{P} \colon m_0(\Psi) = 0,\, m_1(\Psi) = -1\}.$$

Нагадаємо, що $U(x) \to +\infty$ при $|x| \to +\infty$. Тоді для кожного $\varepsilon > 0$ спектр оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$ є дійсним, дискретним і простим. Нехай $\{\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)\}_{k=1}^\infty$ — власні значення $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$, пронумеровані за зростанням, а $\{y_k^\varepsilon(x; \alpha, \Psi)\}_{k=1}^\infty$ — ортонормована в $L_2(\mathbb{R})$ система власних функцій.

Теорема 2.1. *Для кожної пари $(\alpha, \Psi) \in \mathbb{R} \times \mathcal{P}$ власні значення $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ є неперервними функціями змінної $\varepsilon \in (0, 1)$ і залишаються обмеженими зверху при $\varepsilon \to 0$. У випадку δ'-подібного потенціалу спектр операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$ є необмежений знизу при $\varepsilon \to 0$: якщо $\alpha \neq 0$ і $\Psi \in \mathcal{P}_0$, то $\lambda_1^\varepsilon(\alpha, \Psi) \leq -\gamma\varepsilon^{-2}$ для деякої додатної сталої γ. Існує лише скінченна кількість $N(\alpha, \Psi)$ власних значень, які збігаються до $-\infty$ при $\varepsilon \to 0$.*

Доведення. Зафіксуємо α та Ψ. Квадратична форма

$$a_\varepsilon[v] = \int\limits_{\mathbb{R}} \bigl(|v'|^2 + (U + \alpha\Psi_\varepsilon)|v|^2\bigr)\, dx, \qquad v \in C_0^\infty(\mathbb{R})$$

неперервно залежить від ε на $(0, 1)$. Тоді неперервна залежність власних значень від малого параметру випливає з принципу мінімаксу

$$\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi) = \inf_{E_k} \sup_{\substack{v \in E_k,\\ \|v\|=1}} a_\varepsilon[v].$$

Тут E_k — лінійний підпростір $C_0^\infty(\mathbb{R})$ вимірності k, а $\|\cdot\|$ — норма в $L_2(\mathbb{R})$.

Виберемо такий підпростір E_k^*, що носії всіх його елементів не містять точки $x = 0$. Тоді

$$\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi) \leq \sup_{\substack{v \in E_k^*,\\ \|v\|=1}} a_\varepsilon[v]. \tag{2.4}$$

При достатньо малих ε звуження a_ε на скінченновимірний простір E_k^* не залежать від ε, що доводить обмеженість власних значень зверху.

Нехай тепер Ψ — δ'-подібний профіль. Відомо [51, с. 338], що коли Ψ — потенціал з нульовим середнім, то оператор Шредінґера $-\frac{d^2}{d\xi^2} + \alpha\Psi(\xi)$ на прямій при всіх $\alpha \neq 0$ має від'ємне власне значення μ. Отже, існує така нормована в $L_2(\mathbb{R})$ функція u, що

$$\mu = \int\limits_{\mathbb{R}} \bigl(u'^2 + \alpha\Psi(\xi)u^2\bigr)\, d\xi < 0.$$

Введемо невід'ємну функцію-зрізку $\zeta \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, $\operatorname{supp}\zeta = [-2, 2]$ та $\zeta(x) = 1$ при $x \in [-1, 1]$. Далі використовуватимемо позначення $\zeta_\varepsilon(\xi) = \zeta(\varepsilon\xi)$, $\zeta'_\varepsilon(\xi) = \zeta'(\varepsilon\xi)$. Розглянемо послідовність $u_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-1/2}\zeta(x)u(\varepsilon^{-1}x)$. Тоді

$$\|u_\varepsilon\|^2 = \frac{1}{\varepsilon}\int\limits_{\mathbb{R}} \zeta^2(x)u^2(\tfrac{x}{\varepsilon})\, dx = \int\limits_{\mathbb{R}} \zeta_\varepsilon^2(\xi)u^2(\xi)\, d\xi \to \int\limits_{\mathbb{R}} u^2(\xi)\, d\xi = 1$$

при $\varepsilon \to 0$. А з іншого боку, згідно варіаційного принципу

$$\lambda_1(\varepsilon, \alpha) = \inf_{\substack{v \in C_0^\infty,\\ \|v\|=1}} a_\varepsilon[v] \le \frac{a_\varepsilon[u_\varepsilon]}{\|u_\varepsilon\|},$$

а тому

$$\begin{aligned}
\varepsilon^2\|u_\varepsilon\|\, \lambda_1(\varepsilon, \alpha) &\le \varepsilon^2 a_\varepsilon[u_\varepsilon] \\
&= \varepsilon\int\limits_{\mathbb{R}} \bigl((\zeta(x)u(\varepsilon^{-1}x))'^2 + (U + \alpha\Psi_\varepsilon)(\zeta(x)u(\varepsilon^{-1}x))^2\bigr)\, dx \\
&= \int\limits_{\mathbb{R}} \zeta_\varepsilon^2\bigl(u'^2 + \alpha\Psi u^2\bigr)\, d\xi + 2\varepsilon\int\limits_{\mathbb{R}} \zeta_\varepsilon\zeta'_\varepsilon uu'\, d\xi \\
&\quad + \varepsilon^2\int\limits_{\mathbb{R}} \zeta'^2_\varepsilon u^2\, d\xi + \varepsilon\int\limits_{-2}^{2} U(x)\zeta^2(x)u^2(\varepsilon^{-1}x)\, dx.
\end{aligned}$$

Перший інтеграл при $\varepsilon \to 0$ збігається до від'ємного власного значення μ, а решта прямують до нуля, в чому легко переконатися. Отже, для достатньо малих ε справедлива оцінка $\varepsilon^2\|u_\varepsilon\|\, \lambda_1(\varepsilon, \alpha) \le \mu/2$, тобто $\lambda_1(\varepsilon, \alpha) \le -\gamma\varepsilon^{-2}$ для деякого $\gamma > 0$.

Нехай $N_\varepsilon^-(\alpha, \Psi)$ — число від'ємних власних значень оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$. Очевидно, що $N(\alpha, \Psi) \le N_\varepsilon^-(\alpha, \Psi)$ при достатньо малих ε. У випадку неперервного потенціалу виконується нерівність [10, с. 97]

$$N_\varepsilon^-(\alpha, \Psi) \le 1 + \int\limits_{\mathbb{R}} |x|\, |U^-(x)|\, dx + |\alpha|\int\limits_{\mathbb{R}} |x|\, |\Psi_\varepsilon^-(x)|\, dx, \tag{2.5}$$

де $f^-(x) = \min\{f(x), 0\}$ — від'ємна частина функції f. Потенціал U росте при $x \to \infty$, тому U^- є функцією з компактним носієм, а перший з інтегралів в (2.5) є скінченним. Носій Ψ_ε^- міститься в інтервалі $[-\varepsilon, \varepsilon]$, тому

$$\int\limits_{\mathbb{R}} |x|\,|\Psi_\varepsilon^-(x)|\,dx = \varepsilon^{-2}\int\limits_{-\varepsilon}^{\varepsilon} |x|\,|\Psi^-(\frac{x}{\varepsilon})|\,dx = \int\limits_{-1}^{1} |\xi|\,|\Psi^-(\xi)|\,d\xi.$$

Отже, число $N(\alpha, \Psi)$ рівномірно обмежене стосовно малого параметра ε:

$$N(\alpha, \Psi) \le N_\varepsilon^-(\alpha, \Psi) \le c_1(U) + c_2(\Psi)|\alpha|,$$

де $c_1(U)$, $c_2(\Psi)$ — додатні сталі. □

Отже, спектр оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$, взагалі кажучи, розпадається на дві частини: $\{\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)\}_{k=1}^N$ — множина власних значень, які прямують до $-\infty$ при $\varepsilon \to 0$, і $\{\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)\}_{k=N+1}^\infty$ — множина обмежених при $\varepsilon \to 0$ власних значень, яку називатимемо *скінченним спектром* оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$. Можна показати, що власні функції $y_1^\varepsilon(x; \alpha, \Psi), \dots, y_N^\varepsilon(x; \alpha, \Psi)$ локалізуються в околі точки $x = 0$, експоненціально малі поза ним і слабко в $L_2(\mathbb{R})$ збігаються до нуля при $\varepsilon \to 0$.

3. Асимптотика скінченного спектру оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$: головні члени

Розглянемо спектральну задачу

$$-y_\varepsilon'' + \big(U(x) + \alpha\varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)\big)\, y_\varepsilon = \lambda^\varepsilon y_\varepsilon, \qquad y_\varepsilon \in L_2(\mathbb{R}) \tag{3.1}$$

і деяке її власне значення $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ з номером $k > N(\alpha, \Psi)$ позначимо через λ^ε, а відповідну власну функцію — через y_ε. Асимптотичні розвинення λ^ε та y_ε будуватимемо у вигляді

$$\lambda^\varepsilon \sim \lambda + \varepsilon\lambda_1 + \varepsilon^2\lambda_2 + \cdots, \tag{3.2}$$

$$y_\varepsilon(x) \sim v(x) + \varepsilon\, v_1(x) + \varepsilon^2 v_2(x) + \cdots, \qquad \text{коли } |x| > \varepsilon, \tag{3.3}$$

$$y_\varepsilon(x) \sim w(\varepsilon^{-1}x) + \varepsilon\, w_1(\varepsilon^{-1}x) + \varepsilon^2 w_2(\varepsilon^{-1}x) + \cdots, \qquad \text{коли } |x| \le \varepsilon, \tag{3.4}$$

де функції v, v_i визначені на $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ і належать $L_2(\mathbb{R})$, а w, w_i визначені на $[-1, 1]$. Природним є також припущення про відмінність від нуля функції v. В точках $x = \pm\varepsilon$ ряди (3.3), (3.4) задовольняють умови спряження

$$[y_\varepsilon]_{x=\pm\varepsilon} = 0, \quad [y'_\varepsilon]_{x=\pm\varepsilon} = 0, \tag{3.5}$$

де $[f]_{x=a} = f(a+0) - f(a-0)$ — стрибок функції в точці a. Таку комбіновану асимптотику застосовували, зокрема, в [18–20].

Введемо “швидку” змінну $\xi = \varepsilon^{-1}x$. Підставляючи ряди (3.2)–(3.4) у рівняння (3.1), зокрема отримаємо

$$-v'' + U(x)v = \lambda v, \qquad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \tag{3.6}$$
$$-v_1'' + U(x)v_1 = \lambda v_1 + \lambda_1 v, \qquad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \tag{3.7}$$

а також

$$-w'' + \alpha\Psi(\xi)w = 0, \qquad \xi \in (-1,1), \tag{3.8}$$
$$-w_1'' + \alpha\Psi(\xi)w_1 = 0, \qquad \xi \in (-1,1), \tag{3.9}$$
$$-w_2'' + \alpha\Psi(\xi)w_2 = \lambda w - U(0)w, \qquad \xi \in (-1,1). \tag{3.10}$$

Умови спряження (3.5) в точках $x = \pm\varepsilon$ набувають вигляду

$$v(\pm\varepsilon) + \varepsilon\, v_1(\pm\varepsilon) + \cdots \sim w(\pm1) + \varepsilon\, w_1(\pm1) + \cdots,$$
$$v'(\pm\varepsilon) + \varepsilon\, v_1'(\pm\varepsilon) + \cdots \sim \varepsilon^{-1}w'(\pm1) + w_1'(\pm1) + \varepsilon w_2'(\pm1) + \cdots.$$

Розвиваючи величини вигляду $v(\pm\varepsilon)$, $v'(\pm\varepsilon)$ в асимптотичні ряди Маклорена, зокрема отримаємо

$$v(-0) = w(-1), \qquad v(+0) = w(+1), \tag{3.11}$$
$$w'(-1) = 0, \qquad w'(1) = 0, \tag{3.12}$$
$$v'(-0) = w_1'(-1), \qquad v'(+0) = w_1'(1), \tag{3.13}$$
$$v_1(-0) - v'(-0) = w_1(-1), \quad v_1(+0) + v'(+0) = w_1(1), \tag{3.14}$$
$$v_1'(-0) - v''(-0) = w_2'(-1), \quad v_1'(+0) + v''(+0) = w_2'(1). \tag{3.15}$$

Отже, функція v на кожній з півосей є розв’язком рівняння (3.6), а w — розв’язком крайової задачі

$$-w'' + \alpha\Psi w = 0, \quad \xi \in (-1,1), \qquad w'(-1) = 0,\ w'(1) = 0, \tag{3.16}$$

і обидві вони пов’язані умовами спряження (3.11). Задача (3.16) є визначальною у наших міркуваннях, тому що містить інформацію про характер локального збурення потенціалу — профіль Ψ та сталу зв’язку α. Алгоритм побудови асимптотики залежатиме від того, чи має ця задача нетривіальні розв’язки.

3.1. Резонансна множина та функція зв'язку потенціалу Ψ

Трактуватимемо (3.16) як задачу на власні значення зі спектральним параметром α. Функція Ψ є знакозмінною, тому природно ввести простір з індефінітною метрикою. Нехай $\mathcal{K}$ — простір квадратично інтегровних з вагою $|\Psi|$ функцій на $(-1,1)$ зі скалярним добутком $(f,g)=\int_{-1}^{1}|\Psi|\,f\overline{g}\,d\xi$. Введемо в $\mathcal{K}$ індефінітну метрику $[f,g]=\int_{-1}^{1}\Psi f\overline{g}\,d\xi$, перетворивши його в *простір Крейна.* Теорія просторів Крейна описана в [4]. В $\mathcal{K}$ існує *канонічна симетрія* $Jf=\operatorname{sgn}\Psi\cdot f$, така що $(Jf,g)=[f,g]$ для всіх $f,g\in\mathcal{K}$.

Розглянемо в $\mathcal{K}$ оператор T із щільною областю визначення $\mathcal{D}(T)$. Оператор називається *J-невід'ємним*, якщо $[Tx,x]\ge 0$ для всіх $x\in\mathcal{D}(T)$. Оператор T^c, визначений на лінеалі $\mathcal{D}(T^c)=\{y\in\mathcal{K}\colon \exists z\in\mathcal{K},\forall x\in\mathcal{D}(T)\quad [Tx,y]=[x,z]\}$ формулою $T^cy=z$, називається *J-спряженим* до T. Якщо $T=T^c$, то T називається *J-самоспряженим.*

Лема 3.1 ([4, с. 138]). *Нехай T — J-самоспряжений та J-невід'ємний оператор з непорожньою резольвентною множиною. Тоді його спектр $\sigma(T)$ є дійсним, причому, залишковий спектр є порожнім. Якщо λ є ненульовим власним значенням оператора T, то його алгебраїчна і геометрична кратності збігаються. Нульовому власному значенню можуть відповідати ланцюги з власного та лише одного приеднаного вектора.*

Введемо в $\mathcal{K}$ оператор $\mathcal{T}_\Psi=-\frac{1}{\Psi(\xi)}\frac{d^2}{d\xi^2}$ з областю визначення

$$\mathcal{D}(\mathcal{T}_\Psi)=\{f\in\mathcal{K}\mid f\in W_2^2(-1,1),\ \Psi^{-1}f''\in\mathcal{K},\ f'(-1)=0,\ f'(1)=0\}.$$

Тоді задачі (3.16) відповідає спектральне рівняння $\mathcal{T}_\Psi w=-\alpha w$. Хоча диференціальні рівняння зі знакозмінними ваговими функціями досліджувалися багатьма авторами [14, 32, 33, 49], ми доведемо основні властивості оператора $\mathcal{T}_\Psi$.

Теорема 3.1. *Для кожної функції $\Psi\in\mathcal{P}$ оператор $\mathcal{T}_\Psi$ є J-самоспряженим та J-невід'ємним.*

Доведення. Справді, для кожного $f\in\mathcal{D}(\mathcal{T}_\Psi)$ маємо

$$[\mathcal{T}_\Psi f,g]=-\int_{-1}^{1}f''\overline{g}\,d\xi=f(1)\,\overline{g'(1)}-f(-1)\,\overline{g'(-1)}-\int_{-1}^{1}f\,\overline{g''}\,d\xi.$$

Тому рівність $[\mathcal{T}_\Psi f,g]=[f,\mathcal{T}_\Psi^c g]$ виконується, лише коли $g\in\mathcal{D}(\mathcal{T}_\Psi)$

і $\mathcal{T}_\Psi^c g = -\Psi^{-1} g''$. Отже, $\mathcal{T}_\Psi$ – J-самоспряжений. Далі, для всіх $f \in \mathcal{D}(\mathcal{T}_\Psi)$ маємо

$$[\mathcal{T}_\Psi f, f] = -\int_{-1}^{1} f''\overline{f}\, d\xi = \int_{-1}^{1} \left|f'\right|^2 d\xi \geq 0,$$

тобто $\mathcal{T}_\Psi$ є J-невід'ємним. □

Теорема 3.2. *(i) Якщо $\Psi \in \mathcal{P}$, то спектр оператора $\mathcal{T}_\Psi$ є дійсним і дискретним. Всі ненульові власні значення є простими. Нуль завжди є власним значенням, хоча загалом $\ker \mathcal{T}_\Psi \neq \ker \mathcal{T}_\Psi^2$. Нуль є простим власним значенням, коли $m_0(\Psi) \neq 0$.*

(ii) Якщо $\Psi \in \mathcal{P}_0$, то спектр оператора $\mathcal{T}_\Psi$ має дві точки скупчення $-\infty$ і $+\infty$. Окрім того, $\ker \mathcal{T}_\Psi \neq \ker \mathcal{T}_\Psi^2$, тобто нульовому власному значенню відповідає приєднаний вектор.

Доведення. Покажемо, що резольвентна множина оператора $\mathcal{T}_\Psi$ є непорожньою. Однорідна задача

$$g'' + i\Psi g = 0, \quad \xi \in (-1,1), \qquad g'(-1) = 0,\ g'(1) = 0 \tag{3.17}$$

має лише тривіальний розв'язок. Справді, кожен її розв'язок задовольняє рівність

$$\int_{-1}^{1} \left|g'\right|^2 d\xi - i\int_{-1}^{1} \Psi\, |g|^2\, d\xi = 0.$$

Оскільки Ψ — дійсна функція, то функція g є сталою. Але з усіх сталих лише нульова є розв'язком задачі (3.17). Тоді неоднорідна задача $g'' + i\Psi g = f$, $g'(-1) = 0$, $g'(1) = 0$ має єдиний розв'язок для кожної $f \in \mathcal{K}$, тобто $i \in \rho(\mathcal{T}_\Psi)$ та $g = R(i, \mathcal{T}_\Psi)f$, де $R(\lambda, \mathcal{T}_\Psi)$ — резольвента оператора $\mathcal{T}_\Psi$. З леми 3.1 та теореми 3.1 дістаємо дійсність спектру $\sigma(\mathcal{T}_\Psi)$.

Оператор $R(i, \mathcal{T}_\Psi)$ є компактним, що випливає з ланцюжка вкладень

$$\mathcal{D}(\mathcal{T}_\Psi) \subset W_2^2(-1,1) \hookrightarrow L_2(-1,1) \subset \mathcal{K},$$

середнє з яких компактне. Отже, $\sigma(\mathcal{T}_\Psi) = \sigma_p(\mathcal{T}_\Psi)$.

Всі власні значення оператора $\mathcal{T}_\Psi$ є простими. Справді, нехай існують дві лінійно незалежні власні функції φ та ψ, які відповідають власному значенню α. Числа $\varphi(1)$, $\psi(1)$ є ненульовими. Тоді лінійна комбінація $w(\xi) = \psi(1)\varphi(\xi) - \varphi(1)\psi(\xi)$ була б тривіальною як єдиний розв'язок задачі Коші $w'' + \alpha\Psi w = 0$, $w(1) = 0$, $w'(1) = 0$.

Якщо $\Psi \in \mathcal{P}_0$, то необмеженість спектру в обох напрямках є наслідком знакозмінності вагової функції Ψ [14] (див. зауваження 3.1). Нульовому власному значенню оператора $\mathcal{T}_\Psi$, окрім власної функції $w = 1$, відповідає приєднаний вектор

$$w_*(\xi) = \int_{-1}^{\xi} (t - \xi)\Psi(t)\, dt.$$

Він є розв'язком задачі $w''_* = -\Psi(\xi)$, $w'_*(-1) = 0$, $w'_*(1) = 0$, і існує тоді і лише тоді, коли $m_0(\Psi) = 0$. Більше приєднаних векторів немає, згідно леми 3.1. □

Зауваження 3.1. Якщо функція Ψ — непарна, то спектр оператора $\mathcal{T}_\Psi$ є симетричним стосовно початку координат: якщо α — власне значення з власною функція $w(\xi)$, то $-\alpha$ є власним значенням з власною функцією $w(-\xi)$.

Введемо множину $\Sigma_\Psi = \{\alpha \in \mathbb{R}\colon -\alpha \in \sigma(\mathcal{T}_\Psi)\}$, яку називатимемо *резонансною множиною* потенціалу Ψ. Лише для сталих зв'язку α із Σ_Ψ задача (3.16) має нетривіальні розв'язки. Нехай W_α — власна функція задачі (3.16) з власним значенням $\alpha \in \Sigma_\Psi$. Числа $W_\alpha(-1)$ і $W_\alpha(1)$ є завжди ненульовими, тому відношення

$$\theta_\Psi(\alpha) = \frac{W_\alpha(1)}{W_\alpha(-1)}$$

є коректно визначеним. Зауважимо, що величина $\theta_\Psi(\alpha)$ є дійсною, не залежить від вибору власної функції і її можна трактувати як функцію
$\theta_\Psi\colon \Sigma_\Psi \to \mathbb{R}$, задану на резонансній множині. Називатимемо її *функцією зв'язку* потенціалу Ψ. Отже, кожен профіль Ψ породжує резонансну множину та функцію зв'язку.

3.2. Граничний оператор $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$

Алгоритм побудови асимптотики, розпочатий вище, має два різні продовження. Нехай спершу α *не належить резонансній множині* Σ_Ψ. Тоді задача (3.16) має лише тривіальний розв'язок $w = 0$, а з умов спряження (3.11) отримуємо $v(-0) = v(+0) = 0$. Згадуючи (3.6), маємо

$$-v'' + Uv = \lambda v, \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \qquad v(0) = 0, \quad v \in L_2(\mathbb{R}). \tag{3.18}$$

За припущенням функція v є ненульовою, тому λ повинно бути власним значенням задачі (3.18). Отже, граничний оператор $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$ є прямою сумою $S_-\oplus S_+$ операторів Шредінґера на півосях, породжених задачами

$$\begin{cases}-v''+Uv=\lambda v, & x\in\mathbb{R}_-,\\ v(0)=0, & v\in L_2(\mathbb{R}_-),\end{cases}\qquad\qquad \begin{cases}-v''+Uv=\lambda v, & x\in\mathbb{R}_+,\\ v(0)=0, & v\in L_2(\mathbb{R}_+)\end{cases} \tag{3.19}$$

відповідно. Тут $\mathbb{R}_-$ і $\mathbb{R}_+$ — від'ємна та додатна дійсні півосі. Оператори S_-, S_+ мають дійсні, дискретні і прості спектри, об'єднання яких є спектром оператора $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$.

Нехай тепер α *належить резонансній множині* Σ_Ψ, а $w=W_\alpha$ — власна функція задачі (3.16). Тоді умови (3.11) набувають вигляду $v(-0)=W_\alpha(-1)$, $v(+0)=W_\alpha(1)$, звідки, як наслідок, отримуємо

$$v(+0)=\theta_\Psi(\alpha)v(-0). \tag{3.20}$$

Згідно (3.9), (3.13) задача на наступний член ряду (3.4) має вигляд

$$-w_1''+\alpha\Psi w_1=0,\quad \xi\in(-1,1),\qquad w_1'(-1)=v'(-0),\quad w_1'(1)=v'(+0). \tag{3.21}$$

Вона має розв'язок лише тоді, коли $W_\alpha(1)v'(+0)=W_\alpha(-1)v'(-0)$, бо α є власним значенням однорідної задачі (3.16). Умову можна записати і так

$$\theta_\Psi(\alpha)v'(+0)=v'(-0). \tag{3.22}$$

Отже, v повинна бути власною функцією задачі

$$\begin{cases}-v''+Uv=\lambda v, & x\in\mathbb{R}\setminus\{0\},\\ v(+0)-\theta_\Psi(\alpha)v(-0)=0, & \theta_\Psi(\alpha)v'(+0)-v'(-0)=0.\end{cases} \tag{3.23}$$

Задачі (3.23) відповідає зв'язане самоспряжене розширення

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}(\alpha,\Psi)=-\frac{d^2}{dx^2}+U(x),\\ &\mathcal{D}(\mathcal{H}(\alpha,\Psi))=\{f\in\mathcal{D}(L^*)\colon f(+0)\\ &\qquad\qquad =\theta_\Psi(\alpha)f(-0),\ \theta_\Psi(\alpha)f'(+0)=f'(-0)\}\end{aligned} \tag{3.24}$$

оператора L.

Зауваження 3.2. У випадку $\alpha\in\Sigma_\Psi$ теж можна припустити, що $w=0$ і $v(0)=0$, тобто v є власною функцією оператора $S_-\oplus S_+$. Проте, шукаючи w_1, все ж доведеться задовольнити умову (3.22). Якщо v відповідає простому власному значенню оператора $S_-\oplus S_+$, то одне із чисел $v'(-0)$, $v'(+0)$ є нулем, оскільки v тотожно дорівнює нулю на одній з півосей. Тоді з (3.22) матимемо $v'(0) = 0$, що неможливо. Коли ж λ — двократне власне значення, то існує єдина з точністю до множника комбінація власних функцій оператора $S_- \oplus S_+$, яка задовольняє умову (3.22). І ця комбінація є водночас власною функцією задачі (3.23), бо умова (3.20) виконується тривіальним чином. Отже, при $\alpha \in \Sigma_\Psi$ головний член w ряду (3.4) буде нульовим, лише коли $\lambda \in \sigma(\mathcal{H}(\alpha, \Psi)) \cap \sigma(S_- \oplus S_+)$. Цей перетин складається з двократних власних значень оператора $S_- \oplus S_+$, які для $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$ вже є простими.

Зауваження 3.3. При $\alpha = 0$ оператор $\mathcal{H}_\varepsilon(0, \Psi)$ не залежить від ε і є оператором Шредінґера з гладким потенціалом U. З іншого боку, нуль завжди належить резонансній множині, тому оператор $\mathcal{H}(0, \Psi)$ визначається формулою (3.24). Проте нульовому власному значенню оператора $\mathcal{T}_\Psi$ відповідає стала власна функція, тобто $\theta_\Psi(0) = 1$. Тому $\mathcal{H}_\varepsilon(0, \Psi) = \mathcal{H}(0, \Psi)$ для всіх $\varepsilon > 0$.

Отже, для кожного профілю Ψ ми побудували сім'ю самоспряжених операторів $\{\mathcal{H}(\alpha, \Psi)\}_{\alpha \in \mathbb{R}}$. Коли стала зв'язку α не належить резонансній множині Σ_Ψ оператор $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$ є прямою сумою операторів Шредінґера на півосях, а його власні функції описують стани, коли квантово-механічна частинка з ймовірністю 1 знаходиться на одній із півосей. Цю ситуацію умовно називатимемо *випадком закритого δ'-бар'єру*. Коли ж $\alpha \in \Sigma_\Psi$, то оператор $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$ задається формулою (3.24) і є зв'язаним самоспряженим розширенням з матрицею зв'язку

$$C_\alpha = \begin{pmatrix} \theta_\Psi(\alpha) & 0 \\ 0 & \theta_\Psi(\alpha)^{-1} \end{pmatrix} \tag{3.25}$$

в умовах спряження (2.2). Для резонансних α частинка може проникати через бар'єр і з ненульовими ймовірностями знаходитися на кожній з півосей (*випадок відкритого δ'-бар'єру*).

4. Як розуміти δ'-потенціал?

4.1. Історія питання

Формальні гамільтоніани з похідною функції Дірака вивчаються в науковій літературі з 80-х років минулого століття. Першими публікаціями, як нам відомо, були книга [1] (видання 1988 року) та статті [26, 27, 52]. Причому, в точних моделях квантової механіки функція δ' з'являється відразу в двох іпостасях. Розрізняють два фізичні феномени: *δ'-взаємодія* та *точкова дипольна взаємодія* (δ'-потенціал).

S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn та H. Holden в [1] моделюють явище δ'-взаємодії сім'єю самоспряжених операторів

$$\begin{aligned} A_\beta &= -\frac{d^2}{dx^2}, \\ \mathcal{D}(A_\beta) &= \bigl\{ f \in W_2^2(\mathbb{R} \setminus \{0\})\colon f'(-0) = f'(+0), \\ &\qquad\qquad\qquad f(+0) - f(-0) = \beta f'(0) \bigr\}. \end{aligned} \tag{4.1}$$

P. Šeba [52] показав, що цей гамільтоніан можна трактувати як реалізацію евристичного оператора

$$-\frac{d^2}{dx^2} + \beta|\delta'(x)\,\rangle\,\langle\,\delta'(x)|,$$

де $|f\,\rangle\,\langle\,f|$ є позначенням оператора рангу 1

$$(|f\,\rangle\,\langle\,f|\varphi\,\rangle)(x) = f(x) \int\limits_{\mathbb{R}} f(y)\varphi(y)\,dy.$$

У цій же праці P. Šeba досліджує питання про правильне трактування формального гамільтоніана $-\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta'(x)$. Розуміючи $\delta'(x)$ як границю лінійної комбінації

$$\frac{1}{2\varepsilon}\bigl(\delta(x+\varepsilon) - \delta(x-\varepsilon)\bigr)$$

двох δ-функцій в топології $\mathcal{D}'(\mathbb{R})$, автор називає граничний оператор *гамільтоніаном дипольної δ-взаємодії.* Він доводить, що цей гамільтоніан є прямою сумою $S_- \oplus S_+$ з нульовим потенціалом U (див. (3.19)). У теоремі 4, зокрема, доводиться, що сім'я операторів Шредінґера з гладкими потенціалами

$$S_\varepsilon(V) = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\varepsilon^2} V\Bigl(\frac{x}{\varepsilon}\Bigr), \qquad x \in \mathbb{R} \tag{4.2}$$

збігається до $S_- \oplus S_+$ в сенсі рівномірної резольвентної збіжності, за умови, що потенціал V з класу $C_0^\infty(\mathbb{R})$ має нульове середнє, тобто $m_0(V) = 0$. З погляду теорії розсіяння це означає, що δ'-бар'єр є абсолютно непроникним.

Однак, цей результат не цілком узгоджується з дослідженнями, проведеними в [13, 56, 58, 59]. У цих працях вивчали одновимірну задачу розсіяння на кусково сталих δ'-подібних потенціалах, коли формули для коефіцієнта проходження отримуються в явному вигляді, як це зроблено нижче в параграфі 4.3. В [13] вперше, як нам відомо, описали *ефект резонансу для ймовірності проникнення* через такі бар'єри. А саме, доведено, що існує дискретна множина резонансних значень α_n сталої зв'язку, для яких δ'-бар'єр є частково проникним. Числа α_n є коренями трансцендентного рівняння, вигляд якого залежить від профілю кусково сталого потенціалу.

З погляду наших досліджень, цікавою є робота [42]. P. Kurasov та N. Elander запропонували трактувати гамільтоніан з δ'-потенціалом як оператор другої похідної в $L_2(\mathbb{R})$, визначений на $W_2^2(\mathbb{R}\setminus 0)$, з умовами спряження

$$\begin{aligned} f(+0)-f(-0) &= \frac{\alpha}{2}(f(+0)+f(-0)),\\ f'(+0)-f'(-0) &= -\frac{\alpha}{2}(f'(+0)+f'(-0)). \end{aligned} \tag{4.3}$$

Їх означення опиралося на узагальнення функції Дірака та її похідних на випадок розривних у нулі тестових функцій [43]: $\langle\delta^{(n)}(x), \varphi(x)\rangle = \frac{(-1)^n}{2}(\varphi^{(n)}(+0)+\varphi^{(n)}(-0))$. Таке ж означення запропоновано Л. П. Нижником в [48], де оператор Шредінґера з δ'-потенціалом вивчали в просторі Соболєва $W_2^3(\mathbb{R}\setminus 0)$.

Інші шляхи для означення δ'-потенціалу застосовували в [25, 30, 35]. У монографії [3, с. 339] читаємо, що при всіх спробах описати таку взаємодію використовували додаткові припущення, наприклад, певну симетрію взаємодії. Без таких припущень феномен δ'-потенціалу не можна коректно визначити. Це підтверджує нашу тезу про приховані параметри.

4.2. Точна модель для гамільтоніана із потенціалом $\alpha\varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)$

Формальний асимптотичний результат з попереднього параграфу, який обґрунтуємо нижче, вказує на неоднозначність відповіді на запитання, що таке оператор $-\frac{d^2}{dx^2}+\alpha\delta'(x)$. Причиною є прихований параметр моделі — профіль Ψ потенціалу локальної дії.

Проте однозначно можна відповісти на запитання, яка саме з точних моделей адекватно описує рух квантово-механічної частинки в потенціалі $\frac{\alpha}{\varepsilon^2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)$. *Цією моделлю є сім'я операторів* $A(\alpha,\Psi) = -\frac{d^2}{dx^2}$ *з областю визначення*

$$\mathcal{D}(A(\alpha,\Psi)) = \{f\in W_2^2(\mathbb{R}\setminus 0)\colon f(-0)=f(+0)=0\} \quad \textit{при } \alpha\notin\Sigma_\Psi,$$
$$\begin{aligned}\mathcal{D}(A(\alpha,\Psi)) = \{f\in W_2^2(\mathbb{R}\setminus 0)\colon\ & f(+0)=\theta_\Psi(\alpha)f(-0),\\ & \theta_\Psi(\alpha)f'(+0)=f'(-0)\} \ \textit{при } \alpha\in\Sigma_\Psi,\end{aligned}$$

де Σ_Ψ *і* θ_Ψ *— резонансна множина і функція зв'язку потенціалу* Ψ.

Така точна модель узгоджується з результатами [13,56,58,59]. Насправді, ми отримали ефект резонансу для ймовірності проникнення у випадку довільного профілю Ψ і описали резонансну множину як спектральну характеристику цього профілю.

Варто зауважити, що в означенні (4.3) є спільне з нашим те, що матриця зв'язку

$$C_\alpha = \begin{pmatrix} \frac{2+\alpha}{2-\alpha} & 0 \\ 0 & \frac{2-\alpha}{2+\alpha} \end{pmatrix}$$

є теж діагональною, коли $|\alpha| \neq 2$. Крім того, у двох випадках модель описується незв'язаними самоспряженими розширеннями: $f'(-0) = 0$ і $f(+0) = 0$ для $\alpha = -2$, а також $f(-0) = 0$ і $f'(+0) = 0$ для $\alpha = 2$.

З погляду фізики є очевидним, що гладкий потенціал U не впливає на характер умов спряження в початку координат. Не залежать від U також резонансна множина та функція зв'язку. Однак, у міркуваннях попередніх параграфів не можна покласти $U = 0$, бо втрачається дискретність спектру. Нижче наведені два приклади простих моделей з кусково-сталим δ'-подібним потенціалом, які є додатковим аргументом щодо вмотивованості нашого означення.

4.3. Задача про проходження через δ'-подібний бар'єр

Розглянемо рівняння

$$-y'' + \alpha\varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)y = k^2 y, \quad x \in \mathbb{R} \tag{4.4}$$

із δ'-подібним профілем Ψ, таким що $\Psi(\xi) = 1$ при $\xi \in (-1, 0)$ і $\Psi(\xi) = -1$ при $\xi \in (0, 1)$, $k > 0$. Зрозуміло, що результати попередніх розділів справедливі і для кусково гладких потенціалів. Припустимо також, що $\alpha = \varkappa^2 > 0$. Задача розсіяння частинки на потенціалі $\frac{\varkappa^2}{\varepsilon^2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)$ полягає у знаходженні такого розв'язку $y_\varepsilon(x; \varkappa, k)$ рівняння (4.4), що $y_\varepsilon(x; \varkappa, k) = e^{ikx} + R_\varepsilon(\varkappa, k)e^{-ikx}$ при $x < -\varepsilon$ та $y_\varepsilon(x; \varkappa, k) = T_\varepsilon(\varkappa, k)e^{ikx}$ при $x > \varepsilon$. Величини $|R_\varepsilon(\varkappa, k)|^2$, $|T_\varepsilon(\varkappa, k)|^2$ називаються *коефіцієнтом відбиття* та *коефіцієнтом проникнення* відповідно і мають сенс ймовірностей, оскільки $|R_\varepsilon(\varkappa, k)|^2 + |T_\varepsilon(\varkappa, k)|^2 = 1$. Саме цей приклад δ'-подібного потенціалу розглядали в [13]. Ми наводимо його, щоб показати взаємозв'язок між коефіцієнтами розсіяння та введеними нами вище поняттями резонансної множини та функції зв'язку.

Для такого профілю Ψ резонансна множина Σ_Ψ є симетричною стосовно початку координат, а її невід'ємна частина складається з коренів трансцендентного рівняння $h(\sqrt{\alpha}) = 0$, де $h(\varkappa) = \varkappa(\operatorname{th}\varkappa - \operatorname{tg}\varkappa)$. Функція зв'язку має вигляд

$$\theta_\Psi(\alpha) = \frac{\operatorname{ch}\sqrt{\alpha}}{\cos\sqrt{\alpha}} \quad \text{при } \alpha \ge 0, \qquad \theta_\Psi(\alpha) = \frac{\cos\sqrt{-\alpha}}{\operatorname{ch}\sqrt{-\alpha}} \quad \text{при } \alpha < 0. \tag{4.5}$$

Нехай $u_1(\xi;\varkappa,\tau)$, $u_2(\xi;\varkappa,\tau)$ — фундаментальна система розв'язків рівняння

$$-u'' + (\varkappa^2\Psi(\xi) - \tau^2)u = 0, \quad \xi \in (-1,1),$$

елементи якої є гладкими функціями параметрів $\varkappa$ і τ. Такі розв'язки будуються явно за допомогою тригонометричних та гіперболічних функцій. Тоді розв'язок $y_\varepsilon(x;\varkappa,k)$ можна знайти у вигляді

$$y_\varepsilon(x;\varkappa,k) = \begin{cases} e^{ikx} + R_\varepsilon\, e^{-ikx} & \text{при } x < -\varepsilon, \\ C_{\varepsilon,1}\, u_1(\frac{x}{\varepsilon},\varkappa,\varepsilon k) + C_{\varepsilon,2}\, u_2(\frac{x}{\varepsilon},\varkappa,\varepsilon k) & \text{при } |x| < \varepsilon, \\ T_\varepsilon\, e^{ikx} & \text{при } x > \varepsilon. \end{cases}$$

Задовольнивши умови неперервної диференційовності розв'язку в точках $x = \pm\varepsilon$, безпосередніми обчисленнями отримаємо, що

$$T_\varepsilon(\varkappa,k) = \frac{2i\varepsilon k e^{-2i\varepsilon k}}{(2i\varepsilon k - h(\varkappa))\cos\varkappa\operatorname{ch}\varkappa + O(\varepsilon^2k^2)} \tag{4.6}$$

при $\varepsilon k \to 0$. Асимптотична поведінка коефіцієнта проникнення при $\varepsilon \to 0$ залежить від того, чи $\alpha = \varkappa^2$ належить резонансній множині. А саме,

$$|T_\varepsilon(\varkappa,k)|^2 = \frac{4\varepsilon^2k^2}{h^2(\varkappa)\cos^2\varkappa\operatorname{ch}^2\varkappa}\cdot\big(1 + O\left(\varepsilon k\right)\big), \quad \text{коли } \varkappa^2 \notin \Sigma_\Psi, \tag{4.7}$$

$$|T_\varepsilon(\varkappa,k)|^2 = \frac{1}{\cos^2\varkappa\operatorname{ch}^2\varkappa}\cdot\big(1 + O(\varepsilon k)\big), \quad \text{коли } \varkappa^2 \in \Sigma_\Psi. \tag{4.8}$$

Отже, коефіцієнт проникнення прямує до нуля поза резонансною множиною, а ненульову границю має, лише коли $\alpha \in \Sigma_\Psi$, і вона не залежить від k. Цю границю $|T(\alpha)|^2$ можна записати через функцію зв'язку

$$|T(\alpha)|^2 = \frac{4\theta_\Psi^2(\alpha)}{(1+\theta_\Psi^2(\alpha))^2}, \qquad \alpha \in \Sigma_\Psi.$$

Формула залишається справедливою і при від'ємних сталих зв'язку α. Згідно (4.5) коефіцієнт проникнення $|T(\alpha)|^2$ прямує до нуля при $|\alpha| \to +\infty$.

Отже, природно, що оператори $A(\alpha, \Psi)$, визначені в 4.2, є *зв'язними* самоспряженими розширеннями оператора $L_0 = -\frac{d^2}{dx^2}$, $\mathcal{D}(L_0) = \{f \in C_0^\infty(\mathbb{R})\colon f(0) = f'(0) = 0\}$ лише у випадку, коли $\alpha \in \Sigma_\Psi$.

4.4. Оператор Штурма–Ліувілля з δ'-подібним потенціалом

Розглянемо на скінченному інтервалі (a, b), що містить точку $x = 0$, задачу на власні значення

$$-y'' + \alpha\varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)y = \lambda y, \quad x \in (a, b), \qquad y(a) = 0, \quad y(b) = 0, \tag{4.9}$$

де Ψ — кусково-сталий профіль з попереднього прикладу. Фундаментальну систему розв'язків рівняння (4.9) отримуємо в явному вигляді через тригонометричні та гіперболічні функції.

Наведемо результати обчислень лише для $\alpha > 0$. Введемо позначення $\omega = \sqrt{\lambda}$, $\varkappa = \sqrt{\alpha}$, $h_1(\varkappa) = \operatorname{th}\varkappa \operatorname{tg}\varkappa - 1$ та $g(\varkappa) = (1 + \operatorname{th}\varkappa \operatorname{tg}\varkappa)(1 - \operatorname{th}\varkappa \operatorname{tg}\varkappa)^{-1}$. Характеристичний визначник $\Delta(\varepsilon, \varkappa; \omega)$ задачі (4.9), коренями якого є власні частоти ω_ε, має таку асимптотику при $\varepsilon\omega \to 0$:

$$\begin{aligned}\Delta(\varepsilon, \varkappa; \omega) = h(\varkappa)\big\{\operatorname{tg} a\omega \operatorname{tg} b\omega + \varepsilon\omega \left(\operatorname{tg} b\omega - \operatorname{tg} a\omega\right)\big\} \\ + \varepsilon\omega\, h_1(\varkappa)\big(\operatorname{tg} b\omega - g(\varkappa) \operatorname{tg} a\omega\big) + O(\varepsilon^2\omega^2),\end{aligned} \tag{4.10}$$

де функція $h = h(\varkappa)$ — характеристичний визначник задачі (3.16), визначений в 4.3.

Нехай $\alpha \notin \Sigma_\Psi$. Тоді величина $h(\varkappa)$ не дорівнює нулю, а обмежені при $\varepsilon \to 0$ власні частоти ω_ε задачі (4.9) збігаються до коренів рівняння $\operatorname{tg} a\omega \operatorname{tg} b\omega = 0$. Відповідні власні функції y_ε є збіжними в просторі $C(a, b)$, а множина їхніх усяк можливих границь складається з двох серій функцій

$$y_{k,1}(x) = \begin{cases} \sin \frac{\pi k}{a}(x - a), & x \in (a, 0) \\ 0, & x \in (0, b) \end{cases},$$

$$y_{k,2}(x) = \begin{cases} 0 & x \in (a, 0) \\ \sin \frac{\pi k}{b}(x - b), & x \in (0, b) \end{cases},$$

де $k \in \mathbb{N}$. Легко переконатися, що граничні частоти і власні функції відповідають прямій сумі операторів другого диференціювання на інтервалах $(a, 0)$ та $(0, b)$ з умовами Діріхле. Ця сума є аналогом на скінченному відрізку оператора $A(\alpha, \Psi)$ при $\alpha \notin \Sigma_\Psi$, визначеного в 4.2.

Нехай $\alpha \in \Sigma_\Psi$, тобто $h(\varkappa) = 0$, але одночасно $h_1(\varkappa) = \operatorname{th}^2 \varkappa - 1 < 0$. В цьому випадку частоти ω_ε збігаються до коренів рівняння $\operatorname{tg} b\omega = g(\varkappa) \operatorname{tg} a\omega$, причому

$$g(\varkappa) = \frac{1 + \operatorname{tg}^2 \varkappa}{1 - \operatorname{th}^2 \varkappa} = \frac{\operatorname{ch}^2 \varkappa}{\cos^2 \varkappa} = \theta_\Psi^2(\alpha) \quad \text{для } \alpha \in \Sigma_\Psi \cap \mathbb{R}_+.$$

Власні функції y_ε збігаються в $L_2(a, b)$, а також рівномірно на кожному з інтервалів $(a, 0)$ та $(0, b)$, до функцій вигляду

$$y_k(x) = \begin{cases} r(\omega_k) \sin \omega_k (x - a), & x \in (a, 0) \\ \theta(\alpha) \sin \omega_k (x - b), & x \in (0, b) \end{cases},$$

де ω_k — корені рівняння $\operatorname{tg} b\omega = \theta_\Psi^2(\alpha) \operatorname{tg} a\omega$, а $r(\omega) = \frac{\sin b\omega}{\sin a\omega}$, коли $\sin a\omega \neq 0$, та $r(\omega) = \frac{b \cos b\omega}{a \cos a\omega}$, коли $\sin a\omega = 0$. Числа ω_k^2 та функції y_k є власними значеннями та власними векторами задачі Штурма-Ліувілля

$$\begin{cases} -y'' = \lambda y, \quad x \in (a, 0) \cup (0, b), \qquad y(a) = y(b) = 0, \\ y(+0) = \theta_\Psi(\alpha) y(-0), \quad \theta_\Psi(\alpha) y'(+0) = y'(-0), \end{cases}$$

яка породжує на (a, b) оператор, аналогічний до $A(\alpha, \Psi)$ при $\alpha \in \Sigma_\Psi$.

4.5. Відкрита проблема

В розділі 3 ми отримали асимптотику для довільного профілю з класу $\mathcal{P}$. Випадок δ'-подібного потенціалу $\Psi \in \mathcal{P}_0$ характеризується спеціальною структурою резонансної множини Σ_Ψ, яка описана в теоремі 3.2*(ii)*, а також поведінкою функції зв'язку θ_Ψ. Наведені вище приклади і комп'ютерне моделювання задач зі складнішими потенціалами дозволяють нам зробити припущення.

Гіпотеза. *Нехай потенціал Ψ задовольняє умови $m_0(\Psi) = 0$, $m_1(\Psi) = -1$. Тоді його функція зв'язку θ_Ψ має такі властивості:*

- $|\theta_\Psi(\alpha)| > 1$ *для* $\alpha \in \Sigma_\Psi \cap \mathbb{R}_+$ *та* $|\theta_\Psi(\alpha)| \to +\infty$ *при* $\alpha \to +\infty$,
- $|\theta_\Psi(\alpha)| < 1$ *для* $\alpha \in \Sigma_\Psi \cap \mathbb{R}_-$ *та* $|\theta_\Psi(\alpha)| \to 0$ *при* $\alpha \to -\infty$.

Ці властивості пов'язані зі структурою власних функцій J-самоспряженого та J-невід'ємного оператора $\mathcal{T}_\Psi$, тому їхнє доведення мало б отримуватися методами просторів Крейна. Зауважимо, що класи потенціалів, для яких $m_0(\Psi) \neq 0$ чи $m_0(\Psi) = m_1(\Psi) = 0$, містять парні функції. Для парного потенціалу Ψ гіпотеза не підтверджується, оскільки $|\theta_\Psi(\alpha)| = 1$ для всіх $\alpha \in \Sigma_\Psi$.

Функція зв'язку має прозоре фізичне трактування. Нехай v — нормована в $L_2(\mathbb{R})$ власна функція задачі (3.23), а $P_v(a,b) = \int_a^b |v(x)|^2\,dx$ — ймовірність знаходження частинки в інтервалі (a,b), коли система перебуває в чистому стані v. Тоді

$$\theta_\Psi^2(\alpha) = \lim_{r\to+0} \frac{P_v(0,r)}{P_v(-r,0)},$$

тобто $\theta_\Psi^2(\alpha)$ є границею відношення ймовірностей, з якими частинку можна локалізувати в інтервалах $(0,r)$ та $(-r,0)$ відповідно. Для потенціалу $\frac{\alpha}{\varepsilon^2}\Psi(\varepsilon^{-1}x)$, профіль якого зображений зліва на рис. 1, є очевидним, що при $\alpha > 0$ ймовірність локалізувати частинку в інтервалі $(0,\varepsilon)$ над потенціальною ямою є значно більшою, аніж знайти її в $(-\varepsilon,0)$ над високим бар'єром. Отже, величина $|\theta_\Psi(\alpha)|$ повинна бути більшою за одиницю. При $\alpha < 0$ потенціальні яма та бар'єр міняються місцями, тому $|\theta_\Psi(\alpha)| < 1$.

5. Асимптотика скінченного спектру оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$: поправки

Щоб обґрунтувати близькість енергетичних рівнів гамільтоніанів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$ та $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$, нам потрібно знайти ще декілька коефіцієнтів рядів (3.2)–(3.4).

5.1. Асимптотика у випадку закритого δ'-бар'єру

Якщо $\alpha \notin \Sigma_\Psi$, то $w = 0$. Нехай λ — просте власне значення оператора $\mathcal{H}(\alpha,\Psi) = S_- \oplus S_+$ з нормованою в $L_2(\mathbb{R})$ власною функцією v. Не обмежуючи загальності, припустимо, що $\lambda \in \sigma(S_+)$. Зрозуміло, що v дорівнює нулю на $\mathbb{R}_-$. Тоді отримана з (3.9), (3.13) задача

$$-w_1'' + \alpha\Psi w_1 = 0, \quad \xi \in (-1,1), \qquad w_1'(-1) = 0, \quad w_1'(1) = v'(+0)$$

має єдиний розв'язок, оскільки α не є власним значенням (3.16). Згідно (3.7), (3.14) функція $v_1 \in L_2(\mathbb{R})$ на кожній з півосей повинна бути розв'язком задач

$$-v_1'' + Uv_1 = \lambda v_1, \quad x \in \mathbb{R}_-, \qquad v_1(-0) = w_1(-1), \tag{5.1}$$

$$-v_1'' + Uv_1 = \lambda v_1 + \lambda_1 v, \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad v_1(+0) = w_1(1) - v'(+0). \tag{5.2}$$

Перша з них має єдиний розв'язок в $L_2(\mathbb{R}_-)$, бо $\lambda \notin \sigma(S_-)$. Друга є неоднорідною задачею на спектрі, розв'язок якої існуватиме при правильному виборі параметра λ_1. Згідно альтернативи Фредгольма задача (5.2) має розв'язок в $L_2(\mathbb{R}_+)$ тоді і лише тоді, коли $\lambda_1 = v'(+0)(v'(+0) - w_1(1))$. Щоб отримати цю рівність, треба домножити рівняння (5.2) на v та двічі зінтегрувати частинами. Оскільки розв'язок визначений з точністю до ядра однорідної задачі, підпорядкуємо його додатковій умові $\int_{\mathbb{R}_-} vv_1\,dx = 0$. Пам'ятаючи, що $w = 0$, з рівностей (3.10), (3.15) отримуємо задачу

$$\begin{gathered} -w_2'' + \alpha\Psi w_2 = 0, \quad \xi \in (-1,1), \\ w_2'(-1) = v_1'(-0), \quad w_2'(1) = v_1'(+0) + v''(+0) \end{gathered} \tag{5.3}$$

для знаходження функції w_2.

Введемо позначення

$$\Lambda_\varepsilon = \lambda + \varepsilon\lambda_1, \quad Y_\varepsilon(x) = \begin{cases} v(x) + \varepsilon v_1(x), & |x| > \varepsilon, \\ \varepsilon w_1(\varepsilon^{-1}x) + \varepsilon^2 w_2(\varepsilon^{-1}x), & |x| < \varepsilon \end{cases} \tag{5.4}$$

для побудованих наближень власного значення та власної функції збуреної задачі. Такі ж поправки можна знайти і у випадках, коли $\lambda \in \sigma(S_-) \setminus \sigma(S_+)$ та $\lambda \in \sigma(S_-) \cap \sigma(S_+)$.

5.2. Асимптотика у випадку відкритого δ'-бар'єру

Нехай тепер α належить резонансній множині Σ_Ψ, а $w = aW_\alpha$, де W_α — власна функція задачі (3.16), a — довільна стала. Число λ тепер є одним із власних значень задачі (3.23), а v — відповідною нормованою в $L_2(\mathbb{R})$ власною функцією. Зауважимо, що всі власні значення цієї задачі є простими. Беручи до уваги першу з умов (3.11), матимемо $a = \frac{v(-0)}{W_\alpha(-1)}$. Тоді друга з умов теж буде виконуватися, бо $v(+0) = \theta_\Psi(\alpha)v(-0) = \frac{v(-0)}{W_\alpha(-1)}W_\alpha(1) = aW_\alpha(1)$. Згідно зауваження 3.2 стала a є нульовою, коли $\lambda \in \sigma(S_-) \cap \sigma(S_+)$.

За побудовою умова (3.22) гарантує існування розв'язку w_1 задачі (3.21). Він має зображення $w_1 = w_1^* + a_1 W_\alpha$, де w_1^* — деякий частковий розв'язок задачі, а a_1 — довільна стала. Цю сталу ми знайдемо пізніше, отримавши спершу задачу для v_1.

Функція v_1 задовольняє рівняння (3.7) поза нулем, а в нулі має розрив, причому

$$v_1(+0) - \theta_\Psi(\alpha)v_1(-0) = g_1,$$

де $g_1 = w_1(1) - \theta_\Psi(\alpha)w_1(-1) - v'(+0) - \theta_\Psi(\alpha)v'(-0)$. Ця умова отримана з рівностей (3.14). Зауважимо, що стала g_1 не залежить від вибору невідомого досі числа a_1. Справді,

$$\begin{aligned} w_1(1) - \theta_\Psi(\alpha) w_1(-1) = w_1^*(1) - \theta_\Psi(\alpha) w_1^*(-1) \\ + a_1\bigl(W_\alpha(1) - \theta_\Psi(\alpha) W_\alpha(-1)\bigr) = w_1^*(1) - \theta_\Psi(\alpha) w_1^*(-1). \end{aligned}$$

Далі, з (3.10), (3.15) знаходимо задачу для w_2

$$\begin{cases} -w_2'' + \alpha\Psi(\xi) w_2 = (\lambda - U(0))w, & \xi \in (-1,1), \\ w_2'(-1) = v_1'(-0) - v''(-0), \quad w_2'(1) = v_1'(+0) + v''(+0). \end{cases} \tag{5.5}$$

Умову існування розв'язку цієї задачі можна записати у вигляді

$$\theta_\Psi(\alpha) v_1'(+0) - v_1'(-0) = h_1, \tag{5.6}$$

де $h_1 = (w(-1))^{-1}(\lambda - U(0)) \int_{-1}^1 w^2\, d\xi - \theta_\Psi(\alpha) v''(+0) - v''(-0)$. Отже, функція v_1 є розв'язком задачі

$$\begin{cases} -v_1'' + Uv_1 = \lambda v_1 + \lambda_1 v, & x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \\ v_1(+0) - \theta_\Psi(\alpha) v_1(-0) = g_1, \quad \theta_\Psi(\alpha) v_1'(+0) - v_1'(-0) = h_1. \end{cases} \tag{5.7}$$

Перша поправка λ_1 в асимптотиці власного значення знаходиться з умови існування розв'язку задачі (5.7), яка є неоднорідною задачею на спектрі. Згідно альтернативи Фредгольма матимемо $\lambda_1 = g_1 v'(-0) - h_1 v(-0)$. Розв'язок v_1 підпорядкуємо додатковій умові $\int_{\mathbb{R}} v v_1\, dx = 0$.

Тепер, побудувавши поправку v_1, можна знайти сталу a_1. З першої умови (3.14) матимемо $a_1 = (W_\alpha(-1))^{-1}\bigl(v_1(-0) - v'(-0) - w_1^*(-1)\bigr)$. Безпосередньо переконуємося, що друга з умов (3.14) теж виконується.

Отже, у випадку відкритого δ'-бар'єру маємо таке наближення власного значення та власної функції збуреної задачі

$$\Lambda_\varepsilon = \lambda + \varepsilon\lambda_1,$$

$$Y_\varepsilon(x) = \begin{cases} v(x) + \varepsilon v_1(x), & |x| > \varepsilon, \\ \frac{v(-0)}{W_\alpha(-1)} W_\alpha(\varepsilon^{-1}x) + \varepsilon w_1(\varepsilon^{-1}x) + \varepsilon^2 w_2(\varepsilon^{-1}x), & |x| < \varepsilon. \end{cases} \tag{5.8}$$

Тут w_2 — довільний розв'язок задачі (5.5). Вибір сталої a_2 у зображенні $w_2 = w_2^* + a_2 W_\alpha$ не є принциповим, оскільки ми не шукаємо поправку v_2.

6. Обґрунтування асимптотичних розвинень

Як доведено в теоремі 2.1, для кожного сингулярного потенціалу $\alpha\Psi_\varepsilon(x)$ існує скінченне число $N(\alpha,\Psi)$ власних значень $\lambda_k^\varepsilon(\alpha,\Psi)$, які збігаються до $-\infty$ при $\varepsilon\to 0$. Решта власних значень є неперервними і обмеженими функціями малого параметра ε. Покажемо, що всі вони при $\varepsilon\to 0$ збігаються до точок спектру оператора $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$.

6.1. Теорема збіжності

Нехай $\{\lambda_\varepsilon\}_{\varepsilon\in\mathcal{I}}$ — деяка послідовність власних значень оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha,\Psi)$, $\{y_\varepsilon\}_{\varepsilon\in\mathcal{I}}$ — послідовність відповідних власних функцій, нормованих в $L_2(\mathbb{R})$. Тут $\mathcal{I}$ — довільна нескінченна підмножина інтервалу $(0,1)$ з точкою скупчення в нулі.

Теорема 6.1. *Якщо $\lambda_\varepsilon\to\lambda$ та $y_\varepsilon\to v$ слабко в $L_2(\mathbb{R})$ при $\mathcal{I}\ni\varepsilon\to 0$, то λ є власним значенням оператора $\mathcal{H}(\alpha,\Psi)$, а v – відповідна власна функція цього оператора. Крім того, y_ε збігається до v в нормі $L_2(\mathbb{R})$.*

Розіб'ємо доведення цієї теореми на кілька лем.

Лема 6.1. *Нехай виконуються умови теореми 6.1. Тоді для кожного $\gamma>0$ послідовність y_ε збігається до v слабко в $W_2^2(\mathbb{R}\setminus(-\gamma,\gamma))$ та в нормі простору $C^1(\mathbb{R}\setminus(-\gamma,\gamma))$. Крім того, v є розв'язком рівняння Шредінґера*

$$-v''+Uv=\lambda v \tag{6.1}$$

на кожній з півосей $\mathbb{R}_-$ і $\mathbb{R}_+$.

Доведення. Нехай $\mathcal{M}_\gamma$ — множина пробних функцій $\varphi\in C_0^\infty(\mathbb{R})$ таких, що $\varphi(x)=0$ при $x\in(-\gamma,\gamma)$. Тоді з рівняння (3.1) для всіх $\varphi\in\mathcal{M}_\gamma$ та $\varepsilon<\gamma$ отримуємо

$$\int_{\mathbb{R}} y_\varepsilon''\varphi\,dx=\int_{\mathbb{R}}(U-\lambda_\varepsilon)y_\varepsilon\varphi\,dx, \tag{6.2}$$

бо $\operatorname{supp}\Psi_\varepsilon\subset(-\gamma,\gamma)$. Права частина (6.2) має границю при $\varepsilon\to 0$, тому інтеграл зліва теж збігається для всіх $\varphi\in\mathcal{M}_\gamma$. Отже, $y_\varepsilon\to v$ слабко в $W_2^2(\mathbb{R}\setminus(-\gamma,\gamma))$ і

$$\int_{\mathbb{R}} v''\varphi\,dx=\int_{\mathbb{R}}(U-\lambda)v\varphi\,dx,\qquad \varphi\in\mathcal{M}_\gamma.$$

З цієї тотожності випливає, що v є розв'язком рівняння (6.1) на множині $\mathbb{R}\setminus(-\gamma,\gamma)$, а в силу довільності γ — на кожній з півосей. Збіжність y_ε в просторі неперервно диференційовних функцій є наслідком теорем вкладення. □

Лема 6.2. *Нехай $\lambda_\varepsilon \to \lambda$ та $y_\varepsilon \to v$ слабко в $L_2(\mathbb{R})$ при $\mathcal{I} \ni \varepsilon \to 0$. Тоді $y_\varepsilon(\varepsilon) \to v(+0)$, $y'_\varepsilon(\varepsilon) \to v'(+0)$, $y_\varepsilon(-\varepsilon) \to v(-0)$ та $y'_\varepsilon(-\varepsilon) \to v'(-0)$ при $\mathcal{I} \ni \varepsilon \to 0$.*

Доведення. Нехай $\zeta \in C^\infty(\mathbb{R}\setminus\{0\})$ така пробна функція, що $\zeta(x) = 0$ при $x < 0$ і $x \geq 2$, а також $\zeta(x) = 1$ при $x \in (0,1)$. Тут і надалі χ_K — характеристична функція множини K. Введемо послідовність $\zeta_\varepsilon(x) = \chi_{(\varepsilon,\infty)}(x)\zeta(x)$. Домноживши кожне з рівнянь (3.1), (6.1) на функцію ζ_ε і зінтегрувавши, отримаємо

$$y'_\varepsilon(\varepsilon) = -\int_1^\infty y'_\varepsilon \zeta'\,dx + \int_\varepsilon^\infty (\lambda_\varepsilon - U) y_\varepsilon \zeta\,dx,$$

$$v'(\varepsilon) = -\int_1^\infty v'\zeta'\,dx + \int_\varepsilon^\infty (\lambda - U) v\zeta\,dx.$$

Тут враховано, що $\zeta_\varepsilon(\varepsilon+0) = 1$ і $\zeta'_\varepsilon(x) = 0$ при $x \in (\varepsilon, 1)$. В силу леми 6.1 праві частини рівностей мають одну і ту ж границю при $\varepsilon \to 0$, тобто $y'_\varepsilon(\varepsilon) \to v'(+0)$. Скориставшись функцією $\zeta_\varepsilon(-x)$, можна довести, що $y'_\varepsilon(-\varepsilon) \to v'(-0)$.

Тепер візьмемо пробну функцію $\eta \in C^\infty(\mathbb{R}\setminus\{0\})$ таку, що $\eta(x) = 0$ при $x < 0$ і $x \geq 2$, а також $\eta(x) = x$ при $x \in (0,1)$. Нехай $\eta_\varepsilon(x) = \chi_{(\varepsilon,\infty)}(x)\eta(x)$. Врахувавши, що $\eta_\varepsilon(\varepsilon+0) = \varepsilon$ і $\zeta''_\varepsilon(x) = 0$ при $x \in (\varepsilon,1)$, з (3.1), (6.1) матимемо

$$y_\varepsilon(\varepsilon) = \varepsilon y'_\varepsilon(\varepsilon) - \int_1^\infty y_\varepsilon \eta''\,dx + \int_\varepsilon^\infty (U - \lambda_\varepsilon) y_\varepsilon \eta\,dx,$$

$$v(\varepsilon) = \varepsilon v'(\varepsilon) - \int_1^\infty v\eta''\,dx + \int_\varepsilon^\infty (U - \lambda) v\eta\,dx.$$

Згідно з доведеним вище праві частини збігаються до однієї границі, тобто $y_\varepsilon(\varepsilon) \to v(+0)$. Аналогічно доводимо, що $y_\varepsilon(-\varepsilon) \to v(-0)$. □

Тепер проаналізуємо поведінку власних функцій y_ε в околі початку координат. Нехай w та z — розв'язки задач Коші на відрізку $[-1,1]$

$$-w'' + \alpha\Psi(\xi)w = 0, \qquad w(-1) = 1, \quad w'(-1) = 0; \tag{6.3}$$

$$-z'' + \alpha\Psi(\xi)z = 0, \qquad z(-1) = 0, \quad z'(-1) = v'(-0). \tag{6.4}$$

Лема 6.3. *Якщо* $\lambda_\varepsilon \to \lambda$ *та* $y_\varepsilon \to v$ *слабко в* $L_2(\mathbb{R})$ *при* $\varepsilon \to 0$, *то*

$$\left\|\varepsilon^{-1}y_\varepsilon(\varepsilon\xi) - \varepsilon^{-1}y_\varepsilon(-\varepsilon)w(\xi) - z(\xi)\right\|_{C^1([-1,1])} \to 0. \tag{6.5}$$

Доведення. Введемо позначення $w_\varepsilon(\xi) = \varepsilon^{-1}y_\varepsilon(\varepsilon\xi) - \varepsilon^{-1}y_\varepsilon(-\varepsilon)w(\xi) - z(\xi)$. Рівняння (3.1) у змінних $\xi = \varepsilon^{-1}x$ можна записати у вигляді

$$-\frac{d^2y_\varepsilon}{d\xi^2} + \alpha\Psi(\xi)y_\varepsilon = \varepsilon^2(\lambda_\varepsilon - U(\varepsilon\xi))y_\varepsilon.$$

Тоді з (6.3), (6.4) слідує, що функція w_ε на відрізку $[-1,1]$ є розв'язком задачі Коші

$$\begin{cases} -w_\varepsilon'' + \alpha\Psi(\xi)w_\varepsilon = f_\varepsilon(\xi), & \xi \in [-1,1], \\ w_\varepsilon(-1) = 0, \quad w_\varepsilon'(-1) = y_\varepsilon'(-\varepsilon) - v'(-0), \end{cases} \tag{6.6}$$

де $f_\varepsilon(\xi) = \varepsilon(\lambda_\varepsilon - U(\varepsilon\xi))y_\varepsilon(\varepsilon\xi)$. Для кожної функції $f_\varepsilon \in L_2(-1,1)$ існує єдиний розв'язок w_ε з класу $W_2^2(-1,1)$ і виконується оцінка

$$\|w_\varepsilon\|_{W_2^2(-1,1)} \le C\left(\|f_\varepsilon\|_{L_2(-1,1)} + |y_\varepsilon'(-\varepsilon) - v'(-0)|\right) \tag{6.7}$$

з незалежною від ε сталою C. Зважаючи на те, що

$$\int_{-1}^{1} y_\varepsilon^2(\varepsilon\xi)\,d\xi = \frac{1}{\varepsilon}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} y_\varepsilon^2(x)\,dx \le \frac{1}{\varepsilon}\,\|y_\varepsilon\|_{L_2(\mathbb{R})} = \frac{1}{\varepsilon},$$

отримуємо $\varepsilon^{-1/2}\|y_\varepsilon(\varepsilon\xi)\|_{L_2(-1,1)} \le c$. Тоді $\|f_\varepsilon\|_{L_2(-1,1)} \le c\varepsilon^{1/2}$, бо послідовність λ_ε є збіжною. Отже, згідно з лемою 6.2 права частина нерівності (6.7) прямує до нуля. Для завершення доведення треба скористатися теоремою вкладення $W_2^2(-1,1) \subset C^1([-1,1])$. □

Лема 6.4. *Якщо* $\lambda_\varepsilon \to \lambda$, *то відповідна слабко збіжна в* $L_2(\mathbb{R})$ *послідовность власних функцій* y_ε *збігається сильно:* $\|y_\varepsilon - v\|_{L_2(\mathbb{R})} \to 0$ *при* $\varepsilon \to 0$.

Доведення. Спершу покажемо, що послідовність y_ε рівномірно обмежена на $\mathbb{R}$. Згідно з (6.5) та лемою 6.2 послідовність $y_\varepsilon(x)$ рівномірно обмежена на $[-\varepsilon,\varepsilon]$. Справді,

$$\max_{x\in[-\varepsilon,\varepsilon]} |y_\varepsilon(x)| \le c\varepsilon + |z(\varepsilon^{-1}x)|\varepsilon + |y_\varepsilon(-\varepsilon)|\,|w(\varepsilon^{-1}x)| \le c_1. \tag{6.8}$$

Нехай $\Omega_\varepsilon = \mathbb{R} \setminus (-\varepsilon, \varepsilon)$. Домножимо рівняння (3.1) на функцію $\chi_{\Omega_\varepsilon}(x) y_\varepsilon(x)$ і зінтегруємо частинами:

$$\int\limits_{\Omega_\varepsilon} y_\varepsilon'^2\, dx = \lambda_\varepsilon \int\limits_{\Omega_\varepsilon} y_\varepsilon^2\, dx - \int\limits_{\Omega_\varepsilon} U y_\varepsilon^2\, dx + y_\varepsilon'(-\varepsilon) y_\varepsilon(-\varepsilon) - y_\varepsilon'(\varepsilon) y_\varepsilon(\varepsilon).$$

Всі доданки в правій частині є рівномірно обмежені стосовно ε. Для доданку з потенціалом U це легко отримується із ВКБ-асимптотик власних функцій y_ε при великих x [29, с. 55] і обмеженості власних значень λ_ε. Отже, послідовність y_ε є обмежена в $W_2^1(\Omega_\varepsilon)$, тоді і в $C(\Omega_\varepsilon)$. Звідси та з (6.8) маємо, що $\max_{x \in \mathbb{R}} |y_\varepsilon(x)| \le c$, де c не залежить від ε.

Зафіксуємо $\gamma > 0$. Згідно з лемою 6.1 для достатньо малих ε норма різниці $y_\varepsilon - v$ в просторі $L_2(\Omega_\gamma)$ не перевищуватиме γ. Тоді

$$\begin{aligned} \|y_\varepsilon - v\|_{L_2(\mathbb{R})} \le \|y_\varepsilon - v\|_{L_2(\Omega_\gamma)} + \|y_\varepsilon - v\|_{L_2(-\gamma,\gamma)} \\ \le (1 + 2 \max_{x \in \mathbb{R}} |y_\varepsilon(x) - v(x)|)\gamma \le C\gamma \end{aligned}$$

зі сталою C, незалежною від ε. Залишилося зауважити, що число γ можна взяти як завгодно малим. □

Доведення теореми 6.1. Як випливає з лем 6.1 та 6.4 гранична функція v є нетривіальним розв'язком рівняння

$$-v'' + Uv = \lambda v, \qquad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$$

і має одиничну норму в $L_2(\mathbb{R})$. Залишилось показати, що в початку координат v задовольняє потрібні умови спряження. З леми 6.3 випливає, що

$$\varepsilon^{-1}\big(y_\varepsilon(\varepsilon) - y_\varepsilon(-\varepsilon) w(1)\big) \to z(1), \quad y_\varepsilon'(\varepsilon) - \varepsilon^{-1} y_\varepsilon(-\varepsilon) w'(1) \to z'(1) \tag{6.9}$$

при $\varepsilon \to 0$. Беручи до уваги лему 6.2, матимемо $y_\varepsilon(\varepsilon) - y_\varepsilon(-\varepsilon) w(1) \to 0$, $y_\varepsilon(-\varepsilon) w'(1) \to 0$, тобто

$$v(+0) - v(-0) w(1) = 0, \tag{6.10}$$

$$v(-0) w'(1) = 0. \tag{6.11}$$

Спершу припустимо, що $v(-0) \ne 0$, тобто $w'(1) = 0$. Тоді з (6.3) виходить, що w є нетривіальним розв'язком крайової задачі $-w'' + \alpha \Psi w = 0$, $w'(-1) = 0$, $w'(1) = 0$. Отже, в цьому випадку w є власною функцією оператора $\mathcal{T}_\Psi$, а стала зв'язку α належить резонансній множині Σ_Ψ. Далі, $\theta_\Psi(\alpha) = w(1)$, бо за побудовою $w(-1) = 1$. Тому (6.10) збігається з умовою спряження (3.20). З другої умови (6.9) отримуємо, що $v'(+0) = z(1)$, тобто z є розв'язком крайової задачі

$$-z'' + \alpha\Psi z = 0, \qquad z'(-1) = v'(-0), \quad z(1) = v'(+0), \tag{6.12}$$

яка збігається із задачею (3.21). Необхідною умовою існування такого розв'язку є умова (3.22). Отже, v є власною функцією оператора $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$, а границя λ послідовності λ_ε є його власним значенням.

Коли ж $v(-0) = 0$, то з (6.10) виходить, що $v(+0) = 0$. Якщо $\alpha \notin \Sigma_\Psi$, то теорема теж доведена. Нехай α належить Σ_Ψ. Умова (3.20) для v вже виконується. Зрозуміло, що в цьому випадку розв'язок w задачі Коші (6.3) є власною функцією оператора $\mathcal{T}_\Psi$, зокрема, $w'(1) = 0$. Тоді, як ми показали вище, z є розв'язком задачі (6.12), а, отже, v задовольняє і другу умову спряження (3.22). Саме цей випадок описаний у зауваженні 3.2. Теорема доведена. □

Наслідок 6.1. *Кожне власне значення $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$, обмежене знизу при $\varepsilon \to 0$, має границю, яка є точкою спектру оператора $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$.*

Доведення. Проведемо доведення від супротивного. Нагадаємо, що $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ є неперервною функцією параметра $\varepsilon \in (0, 1)$. Припустимо, що

$$\mu_* = \varliminf_{\varepsilon \to 0} \lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi) < \varlimsup_{\varepsilon \to 0} \lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi) = \mu^*,$$

причому числа μ_*, μ^* є скінченними, бо $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ — обмежена функція. Тоді для кожного $\lambda \in [\mu_*, \mu^*]$ існує збіжна до нього послідовність власних значень λ_ε, $\varepsilon \in \mathcal{I}$. Наприклад, множину $\mathcal{I}$ можна отримати як послідовність коренів рівняння $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi) = \lambda$ стосовно ε. Послідовність $\{y_\varepsilon\}_{\varepsilon \in \mathcal{I}}$ нормованих власних функцій містить слабко збіжні підпослідовності. На підставі теореми число λ буде власним значенням оператора $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$. В силу довільності λ відрізок $[\mu_*, \mu^*]$ міститься в $\sigma(\mathcal{H}(\alpha, \Psi))$, що можливо, лише коли $\mu_* = \mu^*$. □

Наслідок 6.2. *До власного значення λ оператора $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$ кратності s може збігатися не більше s власних значень $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$.*

Доведення. Оператор $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$ має лише прості й двократні власні значення. Нехай $s = 1$ і припустимо, що $\lambda_k^\varepsilon(\alpha, \Psi) \to \lambda$ та $\lambda_{k+1}^\varepsilon(\alpha, \Psi) \to \lambda$. Тоді існують дві послідовності $\{y_k^\varepsilon(x; \alpha, \Psi)\}_{\varepsilon \in \mathcal{I}}$, $\{y_{k+1}^\varepsilon(x; \alpha, \Psi)\}_{\varepsilon \in \mathcal{I}}$ власних функцій, кожна з яких в $L_2(\mathbb{R})$ збігається до одного з векторів $e^{i\varphi}v$. Це неможливо, бо елементи цих послідовностей при кожному $\varepsilon \in \mathcal{I}$ є ортогональними в $L_2(\mathbb{R})$. Для $s = 2$ доведення аналогічне (див. деталі в [21]). □

6.2. Квазімоди оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$ та апроксимаційна теорема

Покажемо, що кожна точка спектру $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$ є граничною точкою власних значень операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$.

Нехай B — самоспряжений оператор у гільбертовому просторі H з областю визначення $\mathcal{D}(B)$. Пару $(\mu, u) \in \mathbb{R} \times \mathcal{D}(B)$, де $\|u\|_H = 1$, називатимемо *квазімодою* оператора B із нев'язкою $\rho > 0$, якщо $\|Bu - \mu u\|_H \le \rho$.

Лема 6.5 ([44, 57]). *Нехай спектр оператора B є дискретним і простим. Якщо (μ, u) — квазімода оператора B із нев'язкою $\rho > 0$, то інтервал $[\mu - \rho, \mu + \rho]$ містить власне значення λ оператора B. Крім того, якщо в інтервалі $[\mu - \tau, \mu + \tau]$ немає інших власних значень оператора B, окрім λ, то $\|u - v\|_H \le 2\tau^{-1}\rho$, де v — нормований власний вектор, що відповідає λ.*

Оскільки в розділі 5 ми не будували асимптотик у випадку двократного власного значення λ, тому припустимо, що $\sigma(S_-) \cap \sigma(S_+) = \emptyset$. Ця умова гарантує простоту спектру операторів $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$.

Побудуємо квазімоди операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$. Нехай λ — власне значення оператора $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$ з власною функцією v, $\|v\| = 1$. Тут і далі $\|\cdot\|$ — норма в $L_2(\mathbb{R})$. Для кожного λ та v ми отримали формальні асимптотики Λ_ε, Y_ε, які задаються формулами (5.4) чи (5.8) в залежності від α та Ψ. При обґрунтуванні два різні випадки асимптотик не розрізнятимуться. За побудовою

$$
\begin{aligned}
&-Y_\varepsilon'' + (U(x) - \Lambda_\varepsilon)Y_\varepsilon = \varepsilon^2 R_1(\varepsilon, x), \qquad |x| > \varepsilon,\\
&-Y_\varepsilon'' + (U(x) + \alpha\varepsilon^{-2}\Psi(\varepsilon^{-1}x) - \Lambda_\varepsilon)Y_\varepsilon = \varepsilon R_2(\varepsilon, x), \qquad |x| < \varepsilon,\\
&\quad [Y_\varepsilon]_{x=\pm\varepsilon} = \varepsilon^2 r_1^\pm(\varepsilon), \qquad [Y_\varepsilon']_{x=\pm\varepsilon} = \varepsilon^2 r_2^\pm(\varepsilon),
\end{aligned}
\tag{6.13}
$$

де всі залишки R_j, $r_j^\pm$ є рівномірно обмеженими за своїми аргументами.

Функція Y_ε не належить області визначення оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$, бо має розриви в точках $x = \pm\varepsilon$. Однак, конструктивно будується функція-коректор ζ_ε з такими властивостями:

- ζ_ε — гладка поза точками $x = \pm\varepsilon$ та відмінна від нуля лише при $\varepsilon < |x| < 1$;
- $[\zeta_\varepsilon]_{x=\pm\varepsilon} = -r_1^\pm(\varepsilon)$ та $[\zeta_\varepsilon']_{x=\pm\varepsilon} = -r_2^\pm(\varepsilon)$;
- існує стала c, яка не залежить від ε, що $\max_{\varepsilon<|x|<1}(|\zeta_\varepsilon(x)| + |\zeta_\varepsilon'(x)| + |\zeta_\varepsilon''(x)|) \le c$.

Тоді функція $Y_\varepsilon + \varepsilon^2\zeta_\varepsilon$ є вже неперервно диференційовною в точках $x = \pm\varepsilon$ і належить до $\mathcal{D}(\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi))$. Нехай $\Upsilon_\varepsilon = \|Y_\varepsilon + \varepsilon^2\zeta_\varepsilon\|^{-1}(Y_\varepsilon + \varepsilon^2\zeta_\varepsilon)$. Якщо в формулах (6.13) замінити Y_ε на Υ_ε, то порядок малості залишків у правих частинах не зміниться, бо $\|Y_\varepsilon\| \to 1$ при $\varepsilon \to 0$. Звідки слідує, що пара $(\Lambda_\varepsilon, \Upsilon_\varepsilon)$ є квазімодою оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$ з нев'язкою порядку ε.

Лема 6.6. *Для кожного $\lambda \in \sigma(\mathcal{H}(\alpha, \Psi))$ існує таке власне значення $\lambda_j^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$, що $\lambda_j^\varepsilon(\alpha, \Psi) \to \lambda$. Крім того,*

$$\left|\lambda_j^\varepsilon(\alpha, \Psi) - \lambda\right| \le c_1\varepsilon, \qquad \left\|y_j^\varepsilon(x; \alpha, \Psi) - v(x)\right\|_{L_2(\mathbb{R})} \le c_2\varepsilon, \tag{6.14}$$

де y_j^ε, v — відповідні нормовані власні функції.

Доведення. Нехай $(\Lambda_\varepsilon, \Upsilon_\varepsilon)$ — квазімода оператора $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$, побудована для λ і v. Згідно з лемою 6.5 існує номер j, що $|\lambda_j^\varepsilon(\alpha, \Psi) - \Lambda_\varepsilon| \le c_1\varepsilon$, звідки випливає перша з нерівностей (6.14). Індекс j не залежить від ε за наслідками 6.1, 6.2. Якщо τ менше, ніж відстань від λ до решти спектру оператора $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$, то відрізок $[\lambda - \tau, \lambda + \tau]$ при достатньо малих ε містить лише одне власне значення $\lambda_j^\varepsilon(\alpha, \Psi)$. Тоді $\left\|y_j^\varepsilon(x; \alpha, \Psi) - \Upsilon_\varepsilon(x)\right\|_{L_2(\mathbb{R})} \le 2\tau^{-1}c_1\varepsilon$, звідки отримуємо другу нерівність (6.14). $\square$

Сформулюємо основний результат. Нехай $\{\lambda_k(\alpha, \Psi)\}_{k=1}^\infty$ — власні значення операторів $\mathcal{H}(\alpha, \Psi)$, пронумеровані за зростання, а $\{v_k(x; \alpha, \Psi)\}_{k=1}^\infty$ — ортонормована в $L_2(\mathbb{R})$ система власних функцій. Нагадаємо, що $N = N(\alpha, \Psi)$ — число власних значень операторів $\mathcal{H}_\varepsilon(\alpha, \Psi)$, які збігаються до $-\infty$ при $\varepsilon \to 0$.

Теорема 6.2. *Нехай $(\alpha, \Psi) \in \mathbb{R} \times \mathcal{P}$ і $\sigma(S_-) \cap \sigma(S_+) = \emptyset$. Тоді для всіх натуральних k*

$$\left|\lambda_{k+N}^\varepsilon(\alpha, \Psi) - \lambda_k(\alpha, \Psi)\right| \le c_1\varepsilon, \tag{6.15}$$

$$\left\|y_{k+N}^\varepsilon(x; \alpha, \Psi) - v_k(x; \alpha, \Psi)\right\|_{L_2(\mathbb{R})} \le c_2\varepsilon, \tag{6.16}$$

де сталі c_1, c_2 не залежать від ε.

Доведення. З теореми 6.1, наслідку 6.2 та леми 6.6 випливає, що власне значення $\lambda_{k+N}^\varepsilon(\alpha, \Psi)$ збігається до $\lambda_k(\alpha, \Psi)$ при $\varepsilon \to 0$. Отже, оцінки (6.15), (6.16) є уточненням нерівностей (6.14). $\square$

Ми вдячні Бранко Чургусу, Іллі Камоцькому та Ростиславу Гриніву за цінні поради при написанні цієї праці. Також ми висловлюємо щиру подяку Олексію Костенку, Марку Маламуду та рецензентові.

Їхні зауваження та коментарі, а також вказівки щодо нових публікацій в цій тематиці, допомогли значно вдосконалити текст статті.

Література

[1] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, H. Holden, *Solvable models in quantum mechanics. With an appendix by Pavel Exner. 2nd revised ed.* Providence, RI: AMS Chelsea Publishing, 2005.

[2] S. Albeverio and V. Koshmanenko, *Singular rank one perturbations of self-adjoint operators and Krein theory of selfadjoint extensions* // Potential Anal. **11** (1999), 279–287.

[3] S. Albeverio, P. Kurasov, *Singular perturbations of differential operators and solvable Schrödinger type operators.* Cambridge: Univ. Press, 2000.

[4] Т. Я. Азизов, И. С. Иохвидов, *Основы теории линейных операторов в пространствах с индефинитной метрикой.* Москва: Наука, 1986.

[5] A. Antonevich, *The Schrödinger equation with point interaction in an algebra of new generalized functions.* In: Nonlinear Theory of Generalized Functions. Chapman&Hall, Research notes in mathematics series, **401** (1999).

[6] А. Б. Антоневич, Т. А. Романчук, *Аппроксимации операторов с дельтаобразными коэффициентами* // Актуальные проблемы математики. Сб. науч. трудов. ГрГУ им. Я. Купалы. Гродно, (2008), 11–28.

[7] Н. И. Ахиезер, И. М. Глазман, *Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве.* Москва: Наука, 1966.

[8] Ф. А. Березин, Л. Д. Фадеев, *Замечание об операторе Шредингера с сингулярным потенциалом* // Докл. АН СССР, **32** (1961), 372–375.

[9] J. F. Brasche, M. M. Malamud, H. Neidhardt, *Weyl function and spectral properties of self-adjoint extensions* // Integral Equations Oper. Theory **43** (2002), N 3, 264-–289.

[10] F. A. Berezin, M. A. Shubin, *The Schrödinger equation.* Kluwer Academic Publishers, 1991.

[11] P. Chernoff, R. Hughes, *A new class of point interactions in one dimension* // J. Funct. Anal., **111** (1993), 97–117.

[12] J.-F. Colombeau, *New generalized functions and multiplication of distributions.* North Holland,1989

[13] P. L. Christiansen, H. C. Arnbak, A. V. Zolotaryuk, V. N. Ermakov, Y. B. Gaididei, *On the existence of resonances in the transmission probability for interactions arising from derivatives of Dirac's delta function* // J. Phys. A **36** (2003), 7589–7600.

[14] B. Ćurgus, H. Langer, *A Krein space approach to symmetric ordinary differential operators with an indefinite weigth function* // J. Diff. Eq. **79** (1989), N 1, 31–61.

[15] М. Г. Крейн *Теория самосопряженных расширений полуограниченных эрмитовых операторов и ее приложения.* I // Мат. сборник. **20 (62)** (1947), N 3, 431–495.

[16] V. A. Derkach, M. M. Malamud, *Generalized resolvents and the boundary value problems for Hermitian operators with gaps* // J. Funct. Anal., **95** (1991), N 1, 1—95.

[17] V. A. Derkach, M. M. Malamud, *The extension theory of Hermitian operators and the moment problem* // J. Math. Sc. **73** (1995), N 2, 141–242.

[18] Yu. D. Golovaty, D. Gomez, M. Lobo and E. Perez, *Asymptotics for the eigenelements of vibrating membranes with very heavy thin inclusions* // C.R. Mecanique **330**(2002), N 11, 777–782.

[19] Yu. D. Golovaty, D. Gomez, M. Lobo, E. Perez, *On vibrating membranes with very heavy thin inclusions* // Math. Models Methods Appl. Sci. **14** (2004), N 7, 987—1034.

[20] Ю. Д. Головатый, С. А. Назаров, О. А. Олейник, Т. С. Соболева, *О собственных колебаниях струны с присоединенной массой* // Сиб. мат. журн. **29** (1988), N 5, 71–91.

[21] Ю. Д. Головатый, *Спектральные свойства колебательных систем с присоединенными массами: эффект локальных колебаний* // Труды Московского мат. о-ва **54** (1992), 29–72.

[22] Н. И. Голощапова, Л. Л. Оридорога, *Дифференциальный оператор четвертого порядка с локальными точечными взаимодействиями* // Укр. матем. вiсник **4** (2007), N 3, 355–369.

[23] М. Л. Горбачук, В. И. Горбачук, *Граничные задачи для дифференциально-операторных уравнений.* Киев: Наук. думка, 1984.

[24] В. И. Горбачук, М. Л. Горбачук, А. Н. Кочубей, *Теория расширений симметрических операторов и граничные задачи для дифференциальных уравнений* // Укр. мат. журн. **41** (1989), N 10, 1299–1313.

[25] D. J. Griffiths, *Boundary conditions at the derivative of a delta function* // J. Phys. A, **26** (1993), 2265—2267.

[26] A. Grossmann, R. Høegh-Krohn, M. Mebkhout, *A class of explicitly soluble, local, many-center Hamiltonians for one-particle quantum mechanics in two and three dimensions.* I // J. Math. Phys. **21** (9) (1980), 2376–2385.

[27] P. Exner, H. Neidhardt, V. Zagrebnov, *Potential approximations to δ': an inverse Klauder phenomenon with norm-resolvent convergence* // Commun. Math. Phys. **224** (2001), 593—612.

[28] Ю. В. Егоров, *К теории обобщенных функций* // УМН **45** (1990), Вып. 5 (275), 3–40.

[29] М. В. Федорюк, *Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений.* Москва: Наука, 1983.

[30] F. Gesztesy, H. Holden, *A new class of solvable models in quantum mechanics describing point interactions on the line* // J. Phys. A **20** (1987), 5157–5177.

[31] R. O. Hryniv, Ya. V. Mykytyuk, *1-D Schrödinger operators with periodic singular potentials* // Methods Funct. Anal. Topol. **7** (2001), N 4, 31—42.

[32] I. S. Iohvidov, M. G. Krein and H. Langer, *Introduction to the spectral theory of operators in spaces with an indefinite metric.* Mathematical Research 9, Akademie-Verlag, Berlin, 1982.

[33] I. M. Karabash, A. S. Kostenko, M. M. Malamud, *The similarity problem for J-nonnegative Sturm-Liouville operators* // J. Differential Equations, **246** (2009), 964–997.

[34] Т. Като, *Теория возмущений линейных операторов.* Москва: Мир, 1972.

[35] A. Kiselev, *Some examples in one-dimensional "geometric" scattering on manifolds* // J. Math. Anal. Appl. **212** (1997), 263—280.

[36] А. Н. Кочубей, *Одномерные точечные взаимодействия* // Укр. мат. журн. **41** (1989), N 10, 1391–1395.

[37] А. Н. Кочубей, *Самосопряженные расширения оператора Шредингера с сингулярным потенциалом* // Сиб. мат. журн. **32** (1991), N 3, 60—69.

[38] А. Н. Кочубей, *Симметрические операторы и неклассические спектральные задачи* // Матем. заметки **25** (1979), N 3, 425-–434.

[39] S. Kuzhel, L. Nizhnik, *Finite rank self-adjoint perturbations* // Methods Funct. Anal. Topol. **12** (2006), N 3, 243—253.

[40] V. D. Koshmanenko, *Towards the rank one singular perturbations theory of selfadjoint operators* // Ukrainian Math. J. **43** (1991), N 11, 1559–1566.

[41] В. Д. Кошманенко, *Сингулярные билинейные формы в теории возмущений самосопряженных операторов.* Киев: Наук. думка, 1993.

[42] P. Kurasov, N. Elander, *On the δ'-interactions in one dimension* // Technical report, MSI, Stockholm, 1993.

[43] P. Kurasov, *Distribution Theory for Discontinuous Test Functions and Differential Operators with Generalized Coefficients* // J. Math. Anal. and Appl. **201** (1996), 297–323.

[44] В. Ф. Лазуткин, *Квазиклассическая асимптотика собственных функций.* "Современные проблемы математики. Фундаментальные направления". (Итоги науки и техн. ВИНИТИ АН СССР). М., **34** (1988), 135–174.

[45] V. Mikhailets, V. Molyboga, *One-dimensional Schrödinger operators with singular periodic potentials* // Methods Funct. Anal. Topol. **14** (2008), N 2, 184—200.

[46] L. P. Nizhnik, *On rank one singular perturbations of selfadjoint operators* // Methods Funct. Anal. Topol. **7** (2001), N 3, 54—66.

[47] Л. П. Нижник, *Оператор Шрёдингера с δ'-взаимодействием* // Функц. анализ и его прил. **37** (2003), N 1, 85—88.

[48] Л. П. Нижник, *Одномерный оператор Шрёдингера с точечными взаимодействиями в пространствах Соболева* // Функц. анализ и его прил. **40** (2006), N 2, 74—79.

[49] С. Г. Пятков, *Индефинитные эллиптические спектральные задачи* // Сиб. мат. журн. **39** (1998), N 2, 409–426.

[50] P. Šeba, *The generalized point interaction in one dimension* // Czech. J. Phys. B, **36** (1986), 667–673.

[51] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.* 4*: Analysis of Operators.* Academic Press, New York 1978.

[52] P. Šeba, *Some remarks on the δ'-interaction in one dimension* // Rep. Math. Phys. **24** (1986), N 1, 111—120.

[53] A. M. Savchuk, A. A. Shkalikov, *On the eigenvalues of the Sturm–Liouville operator with potentials from Sobolev spaces* // Math. Notes **80** (2006), N 6, 814—884.

[54] А. М. Савчук, А. А. Шкаликов, *Операторы Штурма–Лиувилля с сингулярными потенциалами* // Матем. заметки **66** (1999), N 6, 897-–912.

[55] А. М. Савчук, А. А. Шкаликов, *Операторы Штурма–Лиувилля с потенциалами-распределениями* // Труды Московского мат. о-ва **64** (2003), 159—212.

[56] F. Toyama, Y. Nogami, *Transmission-reflection problem with a potential of the form of the derivative of the delta function* // J. Phys. A **40** (2007), F685–F690.

[57] М. И. Вишик, А. А. Люстерник, *Регулярное вырождение и пограничный слой для линейных дифференциальных уравнений с малым параметром* // Успехи мат. наук **12** (1957), N 5, 3–122.

[58] A. V. Zolotaryuk, P. L. Christiansen, S. V. Iermakova, *Scattering properties of point dipole interactions* //J. Phys. A: Math. Gen. **39** (2006), 9329–9338.

[59] A. V. Zolotaryuk, *Two-parametric resonant tunneling across the $\delta'(x)$ potential* // Adv. Sci. Lett. **1** (2008), 187–191.

Відомості про авторів

Юрій Данилович Головатий, Степан Степанович Манько

Львівський національний університет
імені І. Франка,
вул. Університетська 1,
Львів 79000
Україна
E-Mail: `yu_holovaty@franko.lviv.ua`, `s_manko@franko.lviv.ua`