Proceedings of IAM, V.3, N.2, 2014, pp.205-211

ОБ ОДНОЙ ЭКСТРЕМАЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ ОПЕРАТОРА ПАУЛИ

Ю.С. Гасымов[1 2], Н.А. Аллахвердиева[3]

[1]Институт Прикладной Математики, БГУ, Баку, Азербайджан
[2]Институт Математики и Механики НАНА, Баку, Азербайджан
[3]Сумгаитский Государственный Университет, Сумгаит, Азербайджан
e-mail: gasimov.yusif@gmail.com

Резюме. В работе рассматривается одна экстремальная задача для собственных значений оператора Паули в переменной области. Получена формула для первой вариации собственного значения относительно области и выведено необходимое условие для оптимальной области.

Ключевые слова: оператор Паули, экстремальная задача, необходимое условие, переменная область.

AMS Subject Classification: 49J45, 49Q10, 49R50.

1. Введение

В работе исследуются собственные значения оператора Паули. Известно, что оператор Паули описывает движение частицы со спином (в отличие от оператора Шредингера) в магнитном поле и является обобщением оператора Шредингера в математическом и кванто-физическом смыслах [7]. Внутренний угловой момент частицы, который был проявлен в эксперименте Штерна-Герлаха, называется спином. Речь идет об угловом моменте, которым обладает частица, даже в том случае, когда она полностью покоится. В квантовой физике показывается, что частица может иметь спин, который не связан с движением ее частей относительно центра масс. В частности, истинная элементарная частица (не имеющая внутренних составных частей) тоже может обладать спином [7]. Поэтому оператор Паули имеет широкое применение в квантовой физике.

Как следует из основных постулатов квантовой физики, собственные значения λ_n оператора Паули описывают полную энергию квантовой системы (в нашем случае электрона со спинов в магнитном поле) в состоянии φ_n, где φ_n- собственная функция оператора Паули, соответствующая собственному значению λ_n [5].

В этой работе мы предполагаем, что область задания оператора переменна. В таком случае и собственная функция φ_n (т.е. состояние квантовой системы) и соответствующее собственное значение λ_n (полная энергия частицы) являются функционалами от области. Изучение поведения этих кванто-механических величин при изменении области, является актуальной задачей, как с теоретической, так и практической точек зрений.

Исследованию функционалов от области посвящены работы многих авторов и предложены различные методы для их решения. В этой работе мы воспользуемся методами, предложенными в [6].

2. Постановка задачи и основные результаты

Через Ω обозначим множество всех выпуклых ограниченных замкнутых множеств из R^2 с гладкими границами. Обозначим

$$K = \{D \in \Omega,\ \ \overline{D} \in \Omega_0,\ S_D \in C^2\},$$

где Ω_0 - некоторое выпуклое подмножество Ω, $\overline{D}$ - замыкание множества D, S_D - граница множества D.

Рассмотрим задачу

$$\lambda_k(D) \to \min,\ \ D \in K\ . \tag{1}$$

Здесь λ_k - k -ое собственное значение следующей спектральной задачи

$$P\varphi = \lambda\varphi\ ,\qquad x \in D \tag{2}$$

$$\varphi = 0,\qquad x \in S_D \tag{3}$$

где P - оператор Паули, порожденный выражением

$$P = P(a,v)\cdot J + \sigma B\ . \tag{4}$$

Здесь $J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\quad \sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\quad P = (a,v) = (-i\nabla - a)^2 + V$,

i - минимальная единица, V - достаточно гладкая функция, $\nabla = \left\{\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right\}$,

$a = (a_1, a_2) \in R^2$ - вектор-потенциал, B - магнитное поле порожденное a, т.е. $B = \frac{\partial}{\partial x} a_2 - \frac{\partial}{\partial y} a_1$.

Если учесть все эти обозначения, то в двумерном случае оператор Паули примет следующий явный вид

$$P = \begin{pmatrix} (-i\nabla - a)^2 + a_2 \frac{\partial}{\partial x} - a_1 \frac{\partial}{\partial y} + V & 0 \\ 0 & (-i\nabla - a)^2 - a_2 \frac{\partial}{\partial x} + a_1 \frac{\partial}{\partial y} + V \end{pmatrix} =$$

$$=\begin{pmatrix} -\Delta+(2ia_1+a_2)\frac{\partial}{\partial x}+(2ia_2-a_1)\frac{\partial}{\partial y}+a^2+V & 0 \\ 0 & -\Delta+(2ia_1-a_2)\frac{\partial}{\partial x}+(2ia_2+a_1)\frac{\partial}{\partial y}+a^2+V \end{pmatrix} \qquad (5)$$

Таким образом, в двумерном случае оператор Паули имеет диагональный вид. Поэтому уравнение (2) распадается на два уравнения.

Возьмем $\varphi=\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$, где $\varphi_1, \varphi_2 \in L_2(D)$.

Тогда из (2) и (5) получим

$$\begin{pmatrix} -\Delta+(2ia_1+a_2)\frac{\partial}{\partial x}+(2ia_2-a_1)\frac{\partial}{\partial y}+a^2+V & 0 \\ 0 & -\Delta+(2ia_1-a_2)\frac{\partial}{\partial x}+(2ia_2+a_1)\frac{\partial}{\partial y}+a^2+V \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}=$$

$$=\lambda\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} &-\Delta\varphi_1+(2ia_1+a_2)\frac{\partial\varphi_1}{\partial x}+(2ia_2-a_1)\frac{\partial\varphi_1}{\partial y}+a^2\varphi_1+V\varphi_1=\lambda\varphi_1 \\ &-\Delta\varphi_2+(2ia_1-a_2)\frac{\partial\varphi_2}{\partial x}+(2ia_2+a_1)\frac{\partial\varphi_2}{\partial y}+a^2\varphi_2+V\varphi_2=\lambda\varphi_2 \end{aligned} \qquad (6)$$

Обозначим

$$P_1=-\Delta+(2ia_1+a_2)\frac{\partial}{\partial x}+(2ia_2-a_1)\frac{\partial}{\partial y}+a^2+V$$

$$P_2=-\Delta+(2ia_1-a_2)\frac{\partial}{\partial x}+(2ia_2+a_1)\frac{\partial}{\partial y}+a^2+V\,.$$

Так как $\varphi_1,\varphi_2\in L_2(D)$, а операторы P_1,P_2 имеют дискретный спектр, то множество собственных значений оператора P есть объединение множеств собственных значений операторов P_1 и P_2. Эти собственные значения при определенных условиях на a могут считаться положительными и пронумерованы в порядке возрастания, учитывая их кратность

$$0\le\lambda_1\le\lambda_2\le\ldots,$$

а соответствующие собственные функции φ_k принадлежат классу $C_1(D)\cap C_2(\overline{D})$.

Произведем замену $\varphi_i'=e^{\alpha x+\beta y}\varphi_i$, $i=1,2$, $\alpha,\ \beta\in R$.

Вычислив производные и подставив их в (6) после простых упрощений получим

$$-\Delta\varphi_1 + V\varphi_1 = \left(\lambda - \frac{1}{4}a^2\right)\varphi_1 \tag{7}$$

$$-\Delta\varphi_2 + V\varphi_2 = \left(\lambda - \frac{1}{4}a^2\right)\varphi_2 \tag{8}$$

После упрощений мы опять принимаем начальные обозначения.
Сначала введем некоторые вспомогательные факты.
Функция

$$P_D(x) = \max_{l\in D}(x,l), \quad x \in R^2 \tag{9}$$

называется опорной функцией множества D [4]. Известно, что опорная функция каждого выпуклого, ограниченного, замкнутого множества является положительно-однородной непрерывно выпуклой. Субдифференциал функции $P(x)$ в точке $0 \in R^n$ определяется выражением

$$\partial P(0) = \left\{l \in R^n : \quad P(x) \geq P(l), \quad x \in R^n\right\}.$$

Верно и обратное утверждение о том, что для каждой положительно однородной, непрерывно выпуклой функции $P(x)$ существует множество D с вышеуказанными свойствами, для которой $P(x)$ является опорной функцией [4]. Это множество, по сути, есть субдифференциал функции $P(x)$ в точке 0, т.е.

$$D = \partial P(0).$$

Пусть $\eta = \lambda - \frac{1}{4}a^2$.

Тогда из (5) и (7),(8) получим, что задача (2),(3) примет следующий вид

$$\begin{array}{ll} \tilde{P}\varphi = \eta\varphi, & x \in D \\ \varphi = 0 \ , & x \in S_D \end{array}, \tag{10}$$

где $\tilde{P} = \begin{pmatrix} -\Delta + V & 0 \\ 0 & -\Delta + V \end{pmatrix}$.

Известно, [3] что собственные значения задачи (10) вычисляются по формуле

$$\eta_k = \inf_{\varphi\in C_2^0(D)} \Phi(\varphi, D) \ , \quad (\varphi, \varphi_n) = 0, \ n = \overline{1, k-1}, \tag{11}$$

где функционал Φ определяется следующим образом

$$\Phi(\varphi, D) = \frac{\int_D \left((\nabla\varphi(x))^2 + V(x)\varphi^2(x)\right)dx}{\int_D \varphi^2(x)dx}. \tag{12}$$

Если предположить, что $D \in \Omega$, то мы получим, что функционал (12), а что то же самое, собственное значение η_k (см.(11)) есть функционал от D.

Дадим следующую теорему формулы для первой вариации этого функционала относительно D.

Теорема 1. Функционал $\eta_k(D)$ дифференцируем по Гато, и его первая вариация вычисляется следующей формулой

$$\delta\eta_k(D_0, D) = -\max_{\varphi_k^0} \int_{S_{D_0}} \left|\nabla \varphi_k^0(x)\right|^2 \times \left[P_D(n(x)) - P_{D_0}(n(x))\right] ds ,$$

где $D,\ D_0 \in \Omega$, $\varphi_k^0(x) = \begin{pmatrix} \varphi_{1k}^0 \\ \varphi_{2k}^0 \end{pmatrix}$; φ_{1k}^0, φ_{2k}^0 - суть k-я собственная функция задачи (7) и (8) в области D_0, соответственно, $\left|\nabla \varphi(x)\right|^2 = \sum_{i=1}^{2} \left(\frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_i} \right)^2$, max берется по всем собственным функциям, соответствующим собственному значению η_k, в случае его кратности, s - граничный элемент.

Схема доказательства этой теоремы схожа с доказательством теоремы из [1]. Поэтому здесь мы не будем его проводить.

Теорема 2. Для того, чтобы $D^* \in K$ минимизировал функционал (1) при (2), (3) необходимо выполнение условия

$$\max_{\varphi_k^*} \int_{S_{D^*}} \left|\nabla \varphi_k^*(x)\right|^2 \left[P_D(n(x)) - P_{D^*}(n(x))\right] ds \le 0 ,$$

для любого $D \in K$. Здесь $\varphi_k^*(x)$- собственная функция задачи (2),(3) соответствующая собственному значению $\lambda_k^* = \lambda_k(D^*)$ в D^*, а max берется по всем собственным функциям φ_k^* в случае кратности λ_k.

Доказательство. Пусть $D \in K$, $\varepsilon \in (0,1)$. Определим $D_\varepsilon = (1-\varepsilon)D^* + \varepsilon D$. $D_\varepsilon \in K$, так как K выпукло. Тогда можем записать

$$\eta_k(D_\varepsilon) - \eta_k(D^*) = -\max_{\varphi_k} \int_{S_{D_\varepsilon}} \left|\nabla \varphi_k^*(x)\right|^2 \left[P_{D_\varepsilon}(n(x)) - P_{D^*}(n(x))\right] ds + o(\varepsilon) \quad (13)$$

Так как [6]

$$P_{D_\varepsilon} - P_{D^*} = (1-\varepsilon)P_{D^*} + \varepsilon P_D - P_{D^*} = \varepsilon\left(P_D - P_{D^*}\right)$$

из (13) будем иметь

$$\lambda_k(D_\varepsilon) - \lambda_k(D^*) = -\varepsilon \max_{\varphi_k} \int_{S_{D_\varepsilon}} \left|\nabla \varphi_k^*(x)\right|^2 \left[P_D(n(x)) - P_{D^*}(n(x))\right] ds + o(\varepsilon).$$

Функционал $\eta_k(D)$ достигает свой минимум при $D = D^*$ по нашему предположению. Поэтому

$$\max_{\varphi_k} \int_{S_{D_\varepsilon}} \left|\nabla \varphi_k^*(x)\right|^2 \left[P_D(n(x)) - P_{D^*}(n(x))\right] ds + \frac{o(\varepsilon)}{\varepsilon} \le 0 .$$

Если взять $\varepsilon \to +0$, то из последнего следует утверждение теоремы.
Теорема доказана.

3. Заключение

Рассматривается задача на собственное значение для оператора Паули с переменной областью. Собственные значения этого оператора рассматриваются как функционал от области. Вычислена формула для первой вариации этого функционала и выведено необходимое условие для оптимальной области.

Литература

1. Gasimov Y.S. On a shape design problem for one spectral functional, Journal of Inverse and Ill-Posed problems, Vol.21, No.5, 2013, pp.629-637.
2. Gasimov Y.S. Some shape optimization problems for eigenvalues. Journal of Physics A.: Mathematical and Theoretical, Vol. 41, No.5, 2008, pp.521-529.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1971, 512 с.
4. Демьянов В.Ф., Рубинов А.М. Основы негладкого анализа и квазидифференциального исчисления, М.: Наука, 1990.
5. Кострикин А.И., Манин Ю.И. Линейная алгебра и геометрия, М.: Наука, 1980.
6. Нифтиев А.А., Гасымов Ю.С. Управление границами и задачами на собственные значения с переменной областью. Издательство «Baku University», 2004, 185 с.
7. Цикон Х., Фрезе З., Кирш В., Саймон Б. Операторы Шредингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии. М.: Мир, 1990, 406 с.

Pauli operatorunun məxsusi ədədləri üçün bir ekstremal məsələ

Y.S. Qasımov, N.A.Allahverdiyeva

XÜLASƏ

İşdə dəyişən oblastlı Pauli operatoru üçün məxsusi ədəd məsələsinə baxılır. Məsələnin məxsusi ədədləri oblastdan asılı funksional kimi araşdırılır. Bu funksionalın birinci variasiyası hesablanır və optimal oblast üçün zəruri şərt tapılır.

Açar sözlər: Pauli operatoru, ekstremal məsələ, zəruri şərt, odəyişən oblast.

On an extremal problem for the eigenvalues of Pauli operator

Y.S. Gasimov, N.A. Allahverdiyeva

ABSTRACT

Eigenvalue problem is considered for the Pauli operator in variable domain. Eigenvalues of the problem are considered as a functional of the domain. A formula is obtained for the first variation of this functional and a necessary condition of optimality is derived for the optimal domain.

Keywords: Pauli operator, extremal problem, necessary condition, variable domain.