arXiv:2603.14121v1 [math-ph] 14 Mar 2026

带椭圆形窗口的量子波导谱分析。

H. NAJAR * F. CHOGLE †

摘要

我们研究两个空间波导通过椭圆窗口耦合时的狄利克雷拉普拉斯算子。椭圆几何打破了旋转对称性，并通过孔径的半轴引入各向异性，从而改变横向模式的耦合及低能谱。我们证明，该算子在本质谱阈值以下具有有限个离散特征值，并研究这些特征值对椭圆几何参数的依赖关系。与圆形情形不同，椭圆情形会产生特征值分裂等谱效应。数值模拟展示了首批特征值和基态随窗口几何形状的变化。

AMS 分类： 81Q10(47B80, 81Q15)
关键词： 量子波导、Schr¨odinger 算子、束缚态、Zaremba问题、狄利克雷拉普拉斯算子。

本文谨以此文纪念 *Oleg Olendeski*。他对研究的热情和慷慨精神对我们影响深远。他对这一领域的贡献弥足珍贵。他与 *H. N.* 的合作以及对 *F. C.* 的指导，对本研究产生了积极影响。

1 引言

椭圆算子的边值问题在数理物理和偏微分方程理论中都占据核心地位。它们自然地出现在量子限域、波传播和扩散过程的建模中，同时也引出与正则性、谱渐近及几何影响相关的基本分析问题。本文研究满足混合狄利克雷–诺伊曼边界条件的拉普拉斯算子的谱性质。这是一个经典问题，其设定介于纯狄利克雷问题与纯诺伊曼问题之间，并兼具两者的特征。

1.1 问题简述

设 Ω 是一个二维或三维区域，其边界分解为两个互不相交的部分，

$$\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N,$$

分别施加齐次狄利克雷边界条件和诺伊曼边界条件。我们考虑拉普拉斯算子的谱问题，即确定特征值E_n及相应的特征函数 $f_n(\mathbf{r})$， $n = 1$，2，.....，使其满足

$$f_n(\mathbf{r})|_{\partial\Omega_D} = 0, \tag{1.1}$$

*莫纳斯提尔大学莫纳斯提尔理学院数学系，突尼斯莫纳斯提尔。研究实验室：代数、几何与谱理论：LR11ES53（电子邮件：hatemnajar@yahoo.fr）
†哈利法科技大学应用数学与科学系，阿联酋阿布扎比 127788（电子邮件：firoz.chogle@ku.ac.ae）

and

$$\mathbf{n} \cdot \nabla f_n(\mathbf{r})\big|_{\partial\Omega_N} = 0, \tag{1.2}$$

其中 $\mathbf{n}$ 表示边界的外向单位法向量。这个混合边值问题通常称为*Zaremba*问题 [45]。它介于纯狄利克雷情形和纯诺伊曼情形之间，因此为研究物理和数学背景中出现的中间谱区域提供了一个自然框架。

Zaremba问题的一个根本难点在于解在两类边界条件交界处附近的行为。记

$$\Sigma = \overline{\partial\Omega_D} \cap \overline{\partial\Omega_N},$$

可以看出，即使 Ω 和边界分区均光滑，标准椭圆正则性在 Σ 处仍会失效。在这个狄利克雷–诺伊曼交界处附近，特征函数通常会表现出奇异行为，其特征是解与交界处距离的非整数次幂。由此，解可能不属于 $H^2(\Omega)$，因此需要借助加权索оболев空间或 Kondrat'ev型渐近展开 [20, 29]进行更精细的解析描述。

尽管具有混合边界条件的拉普拉斯算子具有紧预解式，因此在有界区域中其谱完全离散，但边界奇异性的存在会影响谱渐近以及特征函数的定性结构。与齐次边界条件相比，对特征值分布、节点集和几何–谱关系的分析更加微妙，反映了几何与边界非均匀性之间的相互作用。

这些分析上的挑战促使人们采用数值方法，以便在无法进行显式分析的情形下探究谱性质。然而，混合边值问题的数值处理本身也颇为棘手，因为它要求准确实现异质边界条件，并恰当地解析界面奇异性，尤其是在高维或无界情形下。

混合狄利克雷–诺伊曼边界条件在各种应用中自然出现。经典例子包括部分绝热物体中的热传导 [11], 具有部分反射边界的量子台球 [43], 以及呈现射线分裂现象的系统中的波传播 [40]。量子波导是其中一类尤为重要的例子，其边界的不同部分分别施加不同的边界条件。这一设置自然地将 Zaremba问题推广到无界区域，并带来了新的谱现象。

1.2 量子波导

量子波导为研究几何、边界条件与微分算子谱性质之间的相互作用提供了丰富的试验场。由于它们与纳米结构及电磁波传播密切相关，因而受到广泛关注；例如，可参见专著 [24] 及其中的参考文献。

Exner 及其合作者的开创性研究，在各种几何形状与边界配置下，确立了量子波导谱理论中的许多基本结果[8, 13, 15, 16]。后续研究探讨了离散模型和随机模型 [27, 28, 33], ，进一步阐明了无序与几何形状的影响。

如今，人们已充分认识到，波导的谱性质会受到几何扰动的显著影响。曲率诱导束缚态 [10, 13, 15] 以及由直波导之间的窗口耦合产生的态 [15, 24]，都是广为人知的例子。纯诺伊曼边界条件下的波导也已得到研究 [30, 37]。当狄利克雷条件与诺伊曼条件共存时，还会产生额外的谱效应，包括在原本笔直的几何结构中出现束缚态 [36]。磁场对这类混合边界配置的影响也已有研究 [9, 38, 39]。关于电场的影响，请参见 [2]。

在二维直狄利克雷波导中，研究表明，引入诺伊曼窗口会在本质谱以下产生至少一个束缚态 [10, 15]。这种

构型可用于模拟耦合半导体通道，并且由于纳米尺度制造技术的发展，近年来已具备实验实现的条件 [22]。束缚态的数量会随窗口长度的增加而增加，而其能量则单调降低 [7]。对于带有圆形诺伊曼窗口的三维狄利克雷波导，也获得了类似结果[34], ，并确定了离散谱对窗口半径的依赖关系。

更复杂的几何结构会呈现更丰富的谱行为。在 [35], 中，研究了一个直线型三维波导，其相对的两侧壁上设有两个同心诺伊曼窗口。与单窗口情形相比，额外的几何参数使谱性质和局域化性质能够得到更精细的调控。尤其是，随着内窗口半径变化，谱会呈现显著的反交叉现象，同时特征函数的空间局域化也会发生急剧变化。

1.3 结果

我们研究了通过椭圆窗口耦合的空间波导中的自伴椭圆算子的谱性质。这项工作自然延续了 [34, 35], 中进行的分析；此前，耦合是通过圆形孔径实现的。用椭圆窗口取代圆形窗口，构建出更贴近现实的几何模型，并引入了一类各向异性扰动：它们既与实验密切相关，在数学上也颇具挑战性。

从物理角度来看，与圆形或矩形孔径相比，椭圆窗口能更真实地体现波导之间的耦合器件。在实际应用中，通过机械加工、雕刻或钻孔制成的孔径通常较为狭长，往往与椭圆形状十分接近。因此，椭圆几何能够实现对耦合各向异性的精准调控：通过调整半轴之比，可以优先选择特定的传播方向或横向模式，从而直接影响束缚态、共振态的形成以及波导间的能量传递。

从数学角度看，椭圆窗口引入了一个额外的几何参数，即离心率，从而形成一族连续的区域扰动。这一设定使我们能够系统地研究窗口几何对算子谱性质的影响，包括本质谱阈值以下离散特征值的出现、消失与分岔，它们对半轴的渐近依赖关系，以及圆形情形中对称性的破缺。

椭圆几何固有的旋转不变性丧失，会改变横向模式耦合的结构，并解除与更高对称性相关的简并。改变长宽比可以追踪从本质谱底部涌现的特征值的产生与分裂，从而揭示各向同性构型中不会出现的谱机制。

从谱角度看，窗口的几何形状起着决定性作用。在圆形情形下，高度的对称性使变量分离成为可能，并以贝塞尔函数给出明确的谱刻画，同时精确描述特征值重数和阈值共振。相比之下，椭圆情形更为微妙。尽管在某些受限的平面区域类别中，椭圆由谱确定且具有刚性，但一般的逆谱问题仍未解决。现有结果主要是微扰性的，关注离心率较小的椭圆 [21]。对称性的降低通常会导致特征值变为单重，并使笛卡尔坐标下的变量分离不再成立；虽然在椭圆坐标下可以分离变量，但会得到马丢型算子，且只能提供隐式的谱信息。

本文表明，引入椭圆形孔径后，仍会在本质谱底部以下产生有限个离散特征值。数值计算进一步补充了这一理论结果，展示了这些特征值对椭圆几何参数的依赖关系，从而凸显了各向异性和对称性破缺对耦合波导系统低阶谱结构的定量影响。文中还给出了基态随若干几何参数变化的数值结果。

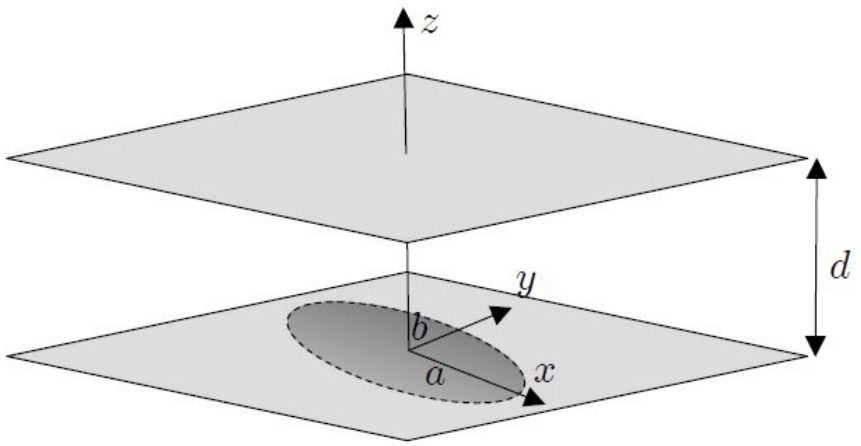

图1：带有半径为 a and 的椭圆形诺伊曼窗口的狄利克雷波导 b.

本文结构安排如下。第2节介绍模型并回顾相关已知结果。第3节阐述主要结果并进行讨论，第 4 节则给出数值模拟。

2 模型与公式

我们要研究的系统如图1所示。我们考虑一个质量为 m_p 的薛定谔粒子，其运动受限于一对相距 d 的平行平面之间。为简单起见，假设这两个平面分别位于 $z=0$ 和 $z=d$。我们将该构型空间记为 Ω

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

设 $\gamma(a,b)$ 为一个半径为 a, b、中心位于 (0,0,0) 的椭圆，其中

$$\gamma(a,b) = \{(x,y,0) \in \mathbb{R}^3;\ \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1\}. \tag{2.3}$$

不失一般性，假设 $0 < b \le a$。令 $\Gamma = \partial\Omega \backslash (\gamma(a,b))$。我们在 Γ 上施加狄利克雷边界条件，并在 $\gamma(a, b)$ 上施加诺伊曼边界条件，这意味着 $\partial\Omega_D$ 和 $\partial\Omega_N$ 在式 (1.1) 和 (1.2) 中具有如下形式： $\partial\Omega_D \equiv \Gamma$， $\partial\Omega_N \equiv \gamma(a,b)$.

2.1 哈密顿量

我们来定义作用于 $L^2(\Omega)$ 上、对应于粒子哈密顿量 $\hat{}H$ 的自伴算子。这通过二次型来实现。具体而言，令 q_0 为二次型

$$q_0(f,g) = \int_\Omega \overline{\nabla f} \cdot \nabla g d\mathbf{r}, \text{ with domain } \mathcal{Q}(q_0) = \{f \in H^1(\Omega);\ f\lceil\partial\Omega_D = 0\}, \tag{2.4}$$

其中 $H^1(\Omega) = \{f \in L^2(\Omega) | \nabla f \in L^2(\Omega)\}$ 是标准索伯列夫空间，我们用$f\lceil\partial\Omega_D$ 表示函数 f 在 $\partial\Omega_D$上的迹。由此可知， q_0 是稠密定义的、对称、正定的闭二次型。我们将与之关联的唯一自伴算子记为

q_0 ˆH ，其区域记为 $D(\Omega)$。它是描述我们系统的哈密顿量。根据 [41] (第 276 页)，我们推知 H 的区域 $D(\Omega)$ 为

$$D(\Omega) = \left\{ f \in H^1(\Omega);\ -\Delta f \in L^2(\Omega), f\lceil\partial\Omega_D = 0, \frac{\partial f}{\partial z}\lceil\partial\Omega_N = 0 \right\}$$

and

$$\hat{H}f = -\Delta f, \quad \forall f \in D(\Omega),$$

其中我们设 $\hbar^2/(2m_p) \equiv 1$。

2.2 一些已知事实

先回顾一下，当 $a = b = 0$ 时这一特殊情形下，我们得到 ˆH^0，即狄利克雷拉普拉斯算子；而在 $a = b = +\infty$ 时，我们得到 H^∞，即诺伊曼拉普拉斯算子。由于

$$\hat{H} = (-\Delta_{\mathbb{R}^2}) \otimes I \oplus I \otimes \left(-\Delta_{[0,d]}\right), \text{on } L^2(\mathbb{R}^2) \otimes L^2([0,d]),$$

（见 [41]），我们得到 ˆH^0 的谱为 $\left[\left(\frac{\pi}{d}\right)^2, +\infty\right[$，而 ˆ$H^\infty$ 的谱为$[(\frac{\pi}{2d})^2, +\infty[$。因此，我们有

$$\left[\left(\frac{\pi}{d}\right)^2, +\infty\right[\subset \sigma\left(\hat{H}\right) \subset \left[(\frac{\pi}{2d})^2, +\infty\right[.$$

利用本质谱在紧扰动下保持不变这一性质，我们ˆ推得，对于任意有限的 a 和 b， H 的本质谱为

$$\sigma_{ess}\left(\hat{H}\right) = \left[(\frac{\pi}{d})^2, +\infty\right[.$$

一个直接推论是，如果离散谱存在，则它位于 $\left[(\frac{\pi}{2d})^2, (\frac{\pi}{d})^2\right]$。

2.3 预备知识：椭圆坐标系

由于系统具有椭圆对称性，引入椭圆坐标系 $(r,\ \theta,\ z)$ 很方便。笛卡尔坐标 $(x,\ y)$ 与椭圆坐标 $(r,\ \theta)$ 的关系为

$$x = c\cosh r\cos\theta, \tag{2.5}$$

$$y = c\sinh r\sin\theta, \tag{2.6}$$

其中 $c > 0$ 是几何常数。坐标满足 $r \geq 0$ 和 $0 \leq \theta < 2\pi$。

常数 $r = r_0$ 的曲线由此得到

$$x = c\cosh r_0\cos\theta, \tag{2.7}$$

$$y = c\sinh r_0\sin\theta. \tag{2.8}$$

利用恒等式 $\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$，这些关系可得

$$\frac{x^2}{c^2\cosh^2 r_0} + \frac{y^2}{c^2\sinh^2 r_0} = 1. \tag{2.9}$$

方程（2.9）描述了一个椭圆，其半长轴为 $a = c\cosh r_0$ ，半短轴为$b = c\sinh r_0$，二者满足

$$a^2 - b^2 = c^2. \tag{2.10}$$

因此， $2c$ 是椭圆两个焦点之间的距离。离心率为 b y

$$e = \frac{c}{a} = \frac{1}{\cosh r_0} = \sqrt{1 - \left(\frac{b}{a}\right)^2}. \tag{2.11}$$

因此， r 为常数的曲面对应于共焦椭圆，而 θ 为常数的曲面对应于共焦双曲线。

具有椭圆截面的三维系统，通常用椭圆柱坐标来描述，

$$\begin{cases} x &= c\cosh r\cos\theta, \\ y &= c\sinh r\sin\theta, \\ z &= z. \end{cases} \tag{2.12}$$

该坐标系是正交的。相应的拉普拉斯算子为

$$\nabla^2 = \frac{2}{c^2(\cosh 2r - \cos 2\theta)}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right] + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{2.13}$$

2.4 特征值问题

The 波函数通过求解下述含时无关的薛定谔方程得到 y

$$-\frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \tag{2.14}$$

其中， V 为系统的势。其表达式为

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & (x,y,z) \in \Omega \\ \infty, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{2.15}$$

波导内的波函数满足定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla^2\Psi = E\Psi. \tag{2.16}$$

利用横截面的椭圆对称性，我们用椭圆柱坐标表示拉普拉斯算子。方程 (2.14) 和 (2.16) 随后可写为

$$-\frac{2}{c^2(\cosh 2r - \cos 2\theta)}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}\right) + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = E\Psi. \tag{2.17}$$

我们寻求如下形式的可分离解

$$\Psi(r,\theta,z) = M(r)N(\theta)Z(z).$$

代入 (2.17) 并除以 MNZ ，得到

$$-\frac{2}{c^2(\cosh 2r - \cos 2\theta)}\left(\frac{1}{M}\frac{d^2M}{dr^2} + \frac{1}{N}\frac{d^2N}{d\theta^2}\right) - \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = E. \tag{2.18}$$

引入常数 E_z，即可分离纵向依赖性

$$-\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = E_z. \tag{2.19}$$

通解为

$$Z(z) = A\cos(\pi\sqrt{E_z}\,z) + B\sin(\pi\sqrt{E_z}\,z), \tag{2.20}$$

其中常数由 z 方向上的边界条件确定。

椭圆窗口的边界对应于 $r = r_0$，其中

$$r_0 = \operatorname{arctanh}\left(\frac{b}{a}\right),$$

在笛卡尔坐标中可表示为

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \tag{2.21}$$

将 E_z 代入 (2.18) 得到角向和径向方程

$$\frac{d^2N}{d\theta^2} + (\lambda - 2q\cos 2\theta)N = 0, \tag{2.22}$$

$$\frac{d^2M}{dr^2} - (\lambda - 2q\cosh 2r)M = 0, \tag{2.23}$$

with

$$q = \frac{c^2(E - E_z)}{4}. \tag{2.24}$$

方程 (2.22) 和 (2.23) 是角向和径向马丢方程。周期角向解仅在离散的特征值 λ 下存在，对应的马丢函数为 $\mathrm{ce}_m(\theta, q)$ 和 $\mathrm{se}_{m+1}(\theta, q)$。相应的径向解由修正马丢函数给出。在边界 $r = r_0$ 处匹配解可得到特征值 E。特定波导构型所需的进一步计算方法将在第 4 节讨论。

3 解析结果

这里我们 证明存在性条件，并给出基于解析考察所得的评估结果。

定理 3.1 算子 $\hat{}H$ 在 $\left[(\frac{\pi}{2d})^2, (\frac{\pi}{d})^2\right]$ 中至少有一个孤立特征值，其中 a 和 b 均非零。

此外，当 b 足够大，且 $E(a,b)$ 是算子 $\hat{}H$ 的一个特征值并小于 $(\frac{\pi}{d})^2$, 时，存在正定常数 C_a 和 C_b，使得

$$E(a,b) \in \left(\frac{C_a}{a^2}, \frac{C_b}{b^2}\right). \tag{3.25}$$

注释 3.25 定理 *3.1* 的第一个结论对于带诺伊曼边界条件的有界曲面的更一般形状$\mathcal{S}$ 也成立，不一定非得是圆盘；只需该曲面包含一个半径为 $a > 0$ 的圆盘即可。

证明。 证明第一个结论时，可以仿照 [34] 中给出的论证，并将其调整为两个窗口的情形；不过，更简单优雅的做法是利用诺伊曼窗口是一种负扰动这一事实 [17]。因此，如果一个诺伊曼窗口产生了束缚态 [34], ，那么加入第二个窗口只会使其能量进一步降低。 ■

第二个断言的证明基于夹逼论证。我们将 $L^2(\Omega)$ 拆分如下： $L^2(\Omega) = L^2(\Omega^-_{a,b}) \oplus L^2(\Omega^+_{a,b})$，其中

$$\begin{aligned}\Omega^-_{a,b} &= \left\{(r,\theta,z) \in \left[0, \operatorname{arctanh}(\frac{b}{a})\right] \times [0, 2\pi[\times[0,d]\right\}, \\ \Omega^+_{a,b} &= \Omega \backslash \Omega^-_{a,b}.\end{aligned}$$

因此，

$$\hat{H}_{a,b}^{-,N} \oplus \hat{H}_{a,b}^{+,N} \leq \hat{H} \leq \hat{H}_{a,b}^{-,D} \oplus \hat{H}_{a,b}^{+,D}.$$

在此，我们根据曲面$r = \tanh^{-1}(\frac{b}{a})$上所考虑的边界条件，以 D 和 N 作为指标。极小极大原理给出

$$\sigma_{ess}\left(\hat{H}\right) = \sigma_{ess}\left(\hat{H}_{a,b}^{+,N}\right) = \sigma_{ess}\left(\hat{H}_{a,b}^{+,D}\right) = \left[(\frac{\pi}{d})^2, +\infty\right[.$$

因此，如果 $\hat{H}^{-,D}_{a,b}$，在 1 以下呈现离散谱，那么 $\hat{H}$ 也同样如此。需要指出的是，这并非必要条件。若以 $E_j\left(\hat{H}^{-,D}_{a,b}\right)$，$E_j\left(\hat{H}^{-,N}_{a,b}\right)$ 和 $E_j\left(\hat{H}\right)$ 分别表示 $\hat{H}^{-,D}_{a,b}$、$\hat{H}^{-,N}_{a,b}$ 和 $\hat{H}$的 j 阶特征值，那么，极小极大原理再次给出如下结果

$$E_j\left(\hat{H}_{a,b}^{-,N}\right) \leq E_j\left(\hat{H}\right) \leq E_j\left(\hat{H}_{a,b}^{-,D}\right) \tag{3.26}$$

以及对于 $j \geq 2$

$$E_{j-1}\left(\hat{H}_{a,b}^{-,D}\right) \leq E_j\left(\hat{H}\right) \leq E_j\left(\hat{H}_{a,b}^{-,D}\right). \tag{3.27}$$

由于计算截锥的特征值并非易事，我们指出

$$E_j\left(\hat{H}_{a,a}^{-,D}\right) \leq E_j\left(\hat{H}_{a,b}^{-,D}\right) \leq E_j\left(\hat{H}_{b,b}^{-,D}\right) \tag{3.28}$$

（相应诺伊曼哈密顿量 $\hat{H}^{-,N}$ 也满足同样的等式链）。因此，由方程（3.27）和（3.28）可得:

$$E_{j-1}\left(\hat{H}_{a,a}^{-,D}\right) \leq E_j\left(\hat{H}\right) \leq E_j\left(\hat{H}_{b,b}^{-,D}\right). \tag{3.29}$$

哈密顿量 $\hat{H}^{-,D}_{\xi\xi}$，具有一列特征值 [1, 32, 44]，其表达式为

$$E_{mnl}(\xi) = (l\pi)^2 + \left(\frac{x_{|m|n}}{\xi}\right)^2,$$

其中，$x_{|m|n}$ 是 $|m|$ 阶贝塞尔函数的第 n 个正零点（见 [1, 44]），而指标 j综合了三个量子数：横向量子数 l、径向量子数 n和方位角量子数 m；$j \equiv (l, m, n)$。条件

$$E_{mnl} \leq (\frac{\pi}{d})^2 \tag{3.30}$$

可得 $l = 0$，因此我们得到 $E_{mn0}(b) = \left(x_{|m|n}/b\right)^2$ 以及 $E_{m'n'0}(a) = \left(x_{|m'|n'}/a\right)^2$，其中带撇号的$n$ 和 m 指的是（3.29）中的指标 $j-1$。相应地，对于哈密顿量 $\hat{H}$ 的任意特征值 $\lambda(a, b)$，存在 $m, n, m', n' \in \mathbb{N}$，使得

$$\frac{x^2_{|m'|n'}}{a^2} \leq E(a,b) \leq \frac{x^2_{|m|n}}{b^2}. \tag{3.31}$$

当 b 足够大时，我们得到结果。■

上述推导表明，方程（3.25）中的系数 C_a 和 C_b 实际上是贝塞尔函数零点的平方。

4 数值计算

本节介绍用于计算第2.4节所构建的特征值问题所得离散谱的数值实现。我们仅讨论与数值过程相关的方面，不再重复解析推导。我们分析本征能量 E 对 a 和 b取值的依赖关系，考察它们在整个变化范围内的

变化。

在整个数值分析过程中，能量以 $(\pi/d)^2$，为单位测量，使本质谱底部归一化为 $E = 1$。长度以波导宽度 d 为单位表示，动量则以 $1/d$为单位。

构型空间分为两个区域：区域 I（$r \le r_0$），对应椭圆窗口；区域 II（$r > r_0$），对应直波导。由于势关于原点对称，波函数可分为偶解和奇解两类。不失一般性，偶波函数的通解为：

$$\Psi_m^{\mathrm{I}}(r,\theta,z) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n^m \mathrm{Ce}_m(r, q_n^{\mathrm{I}})\mathrm{ce}_m(\theta, q_n^{\mathrm{I}}) Z_n^{\mathrm{I}}(z),\ r \le r_0 \tag{4.32}$$

$$\Psi_m^{\mathrm{II}}(r,\theta,z) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^m \mathrm{Ke}_m(r, |q_n^{\mathrm{II}}|)\mathrm{ce}_m(\theta, q_n^{\mathrm{II}}) Z_n^{\mathrm{II}}(z),\ r \ge r_0. \tag{4.33}$$

文献中采用了多种记法来描述修正马丢函数，我们遵循 [1] 中报告的记法和公式。函数 Ce_m 和 Ke_m 分别是第一类和第三类径向修正马丢函数。角向马丢函数 ce_m 称为余弦椭圆函数，因为其性质与相应的三角函数相似。类似地，径向马丢函数的行为与贝塞尔函数相似。横向函数$Z_n(z)$ 满足第 2.4 节中引入的一维特征值问题，其表达式为

$$Z_n^{\mathrm{I}}(z) = \sqrt{2}\cos\left(\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi z\right),\ E_n^{\mathrm{I}} = \left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{4.34}$$

$$Z_n^{\mathrm{II}}(z) = \sqrt{2}\sin((n+1)\pi z),\ E_n^{\mathrm{II}} = (n+1)^2 \tag{4.35}$$

其中，指标 $n = 0,1,2,\ldots$及 E_n 分别对应其能量。参数 $q_n^{\mathrm{I/II}}$取决于纵向波函数的能量，其表达式为

$$q_n^{\mathrm{I/II}} = \frac{c^2(E - E_n^{\mathrm{I/II}})}{4} \tag{4.36}$$

从物理角度来看，在波导中引入窗口会扰动粒子动力学，并导致粒子在区域 I 中局域化。没有窗口时，谱由狄利克雷边界条件决定，最低允许能量为$E_0^{\mathrm{II}} = 1$。

当窗口半径非零时，束缚态的出现可归因于诺伊曼窗口所引起的横向和角向自由度之间的耦合。这种耦合使最低横向模低于基传播阈值，从而产生一个与连续谱分离的特征值。相应的特征函数是平方可积的，并在无穷远处衰减。

存在窗口时，粒子能量可低至 $E_0^{\mathrm{I}} = \frac{1}{4}$。因此，束缚态存在需满足以下条件 –

$$E_0^{\mathrm{I}} < E < E_0^{\mathrm{II}} \tag{4.37}$$

其中 E 为粒子的总能量。数学上，在圆盘 $r = r_0$ 的边界处匹配方程（4.32）和（4.33）中给出的波函数。对于给定的 m，可得到以下齐次线性方程组

$$\sum_{n=0}^{\infty} F_{nn'} B_n^m = 0 \tag{4.38}$$

其中无限方阵 $\mathbf{F}$ 的矩阵元为

$$F_{nn'} = \left[\frac{\mathrm{Ce}'_m(r_0, q_n^{\mathrm{I}})}{\mathrm{Ce}_m(r_0, q_n^{\mathrm{I}})} - \frac{\mathrm{Ke}'_m(r_0, |q_{n'}^{\mathrm{II}}|)}{\mathrm{Ke}_m(r_0, |q_{n'}^{\mathrm{II}}|)}\right] \cdot P_{nn'} \tag{4.39}$$

这里，马丢函数上方的撇号表示其对自变量的导数。矩阵元 $P_{nn'}$ 描述了不同区域的横向模态与角向模态之间的耦合

$$P_{nn'} = \int_0^1 Z_n^{\mathrm{I}}(z) Z_{n'}^{\mathrm{II}}(z) dz \cdot \int_0^{2\pi} \mathrm{ce}_m(\theta, q_n^{\mathrm{I}}) \mathrm{ce}_m(\theta, q_{n'}^{\mathrm{II}}) d\theta. \tag{4.40}$$

当矩阵**F** 是奇异矩阵时，即 **det(F)=0**，方程（**4.38**）存在非平凡解。该方程的根给出特征值 E。图（2）描绘了基态波函数 $m = 0$ 的束缚态能量随半长轴和半短轴 a 与 b变化的情况。当轴长较小时，粒子能量接近上狄利克雷阈值 $E_0^{\mathrm{II}} = 1$。轴长增大时，能量降低并趋近下阈值 $E_0^{\mathrm{I}} = 1/4$。当 $a = b$时，所得能量变化趋势与[35]中的一致。此外，该图关于直线 $a = b$ 对称，这表明椭圆窗口的朝向不会影响能量。

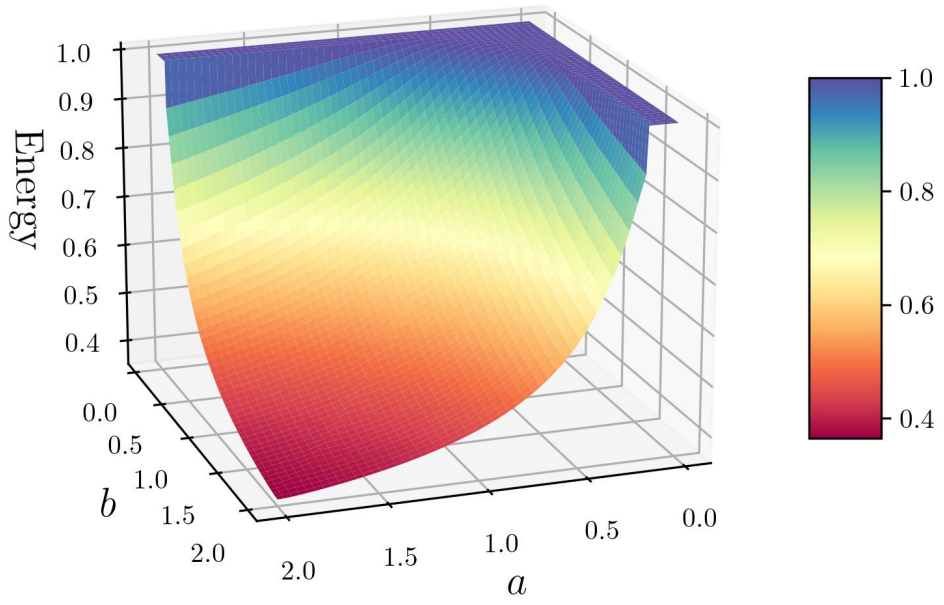

图 2：基态波函数的能谱（$m = 0$）随椭圆轴 a 和 b变化。

对于足够小的半径，能量非常接近均匀狄利克雷波导的基本传播阈

均匀狄利克雷波导的旧模型,

$$E_0^{DD} = 1.$$

据推测，在单窗口的情况下，该束缚态的能量在半径较小时取决于 a ，其形式为 [17]

$$E_0(a) = 1 - \exp\Big(\frac{c}{a^3}\Big).$$

文献 [35], 证明，常数 c 满足 $0.44 \leq c \leq 0.45$. 。对于非常接近圆盘的椭圆形窗口，文献 [37] 证明，在 $b = \varepsilon b'$ 且 $a = \varepsilon a'$，这一特殊情况下，当 $\varepsilon \to 0$时，能量的变化形式为

$$E_0(a, b) = 1 - \varepsilon^2 C_{a,b} + o(\varepsilon^2). \tag{4.41}$$

我们的数值结果证实了这种二次变化。事实上，如图3所示，对于$a = 0.4$ 和 $a = 0.5$，离心率减小会使曲线呈现明显的抛物线型轮廓。相比之下，对于 $a = 1$ 和 $a = 1.5$，其变化则呈双曲线型，如图4所示。窗口的形状见图5(a)。

随着参数 a 增大，曲线由凹形轮廓转变为凸形轮廓。存在一个接近 $a = 0.75$的临界值 a_c ，它将这两种截然不同的变化分隔开来，见图6。

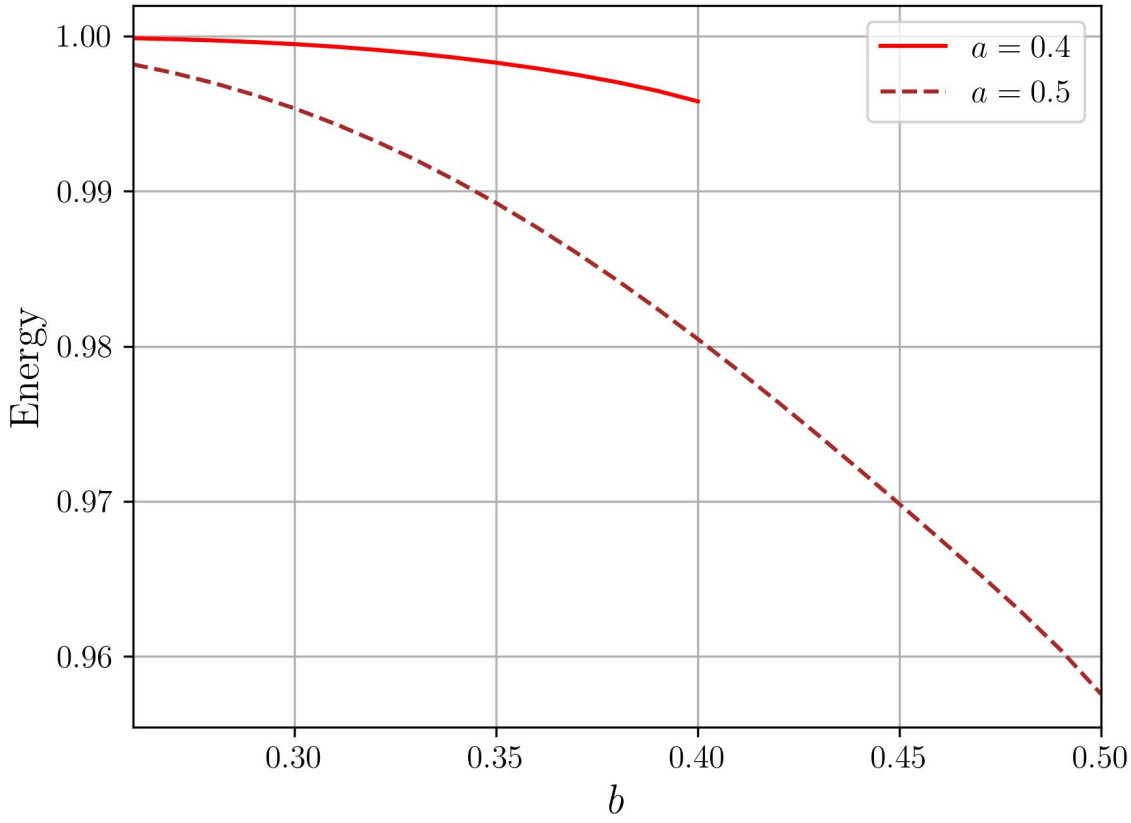

图 3：当 a 固定且离心率减小时的能量曲线

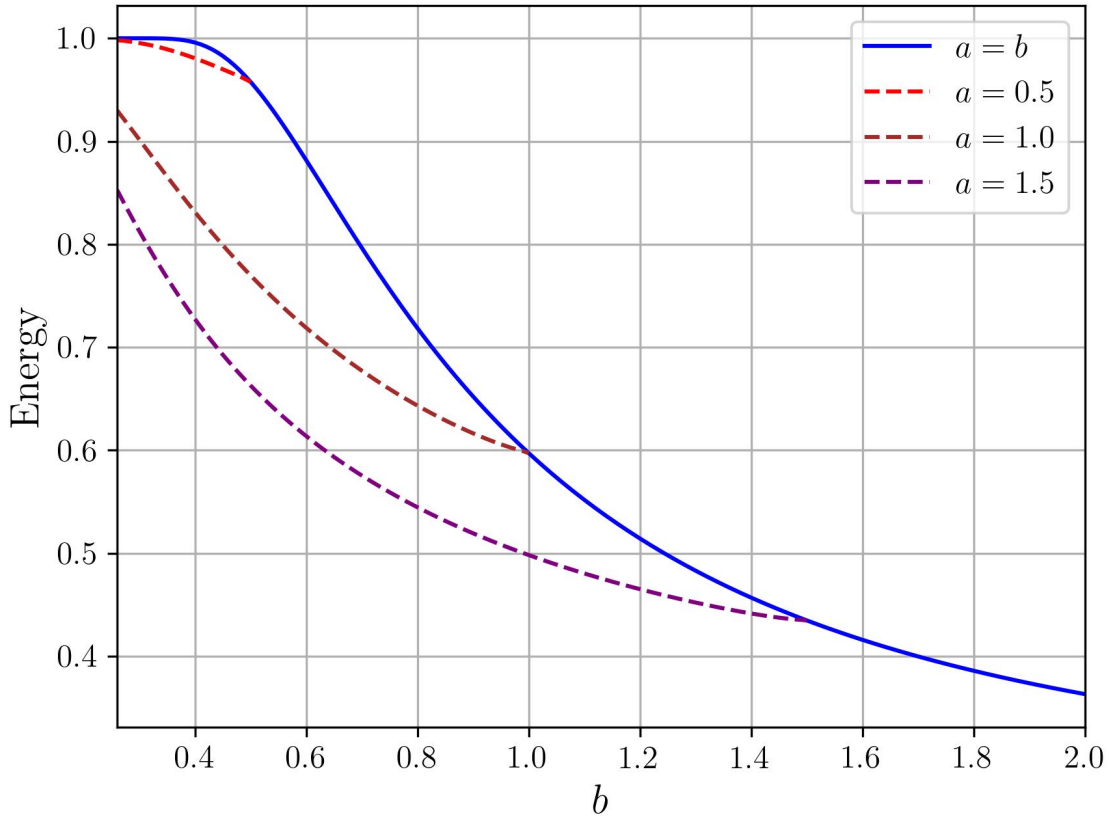

图4: $a = 1$ 和 $a = 1.5$对应曲线的双曲行为。

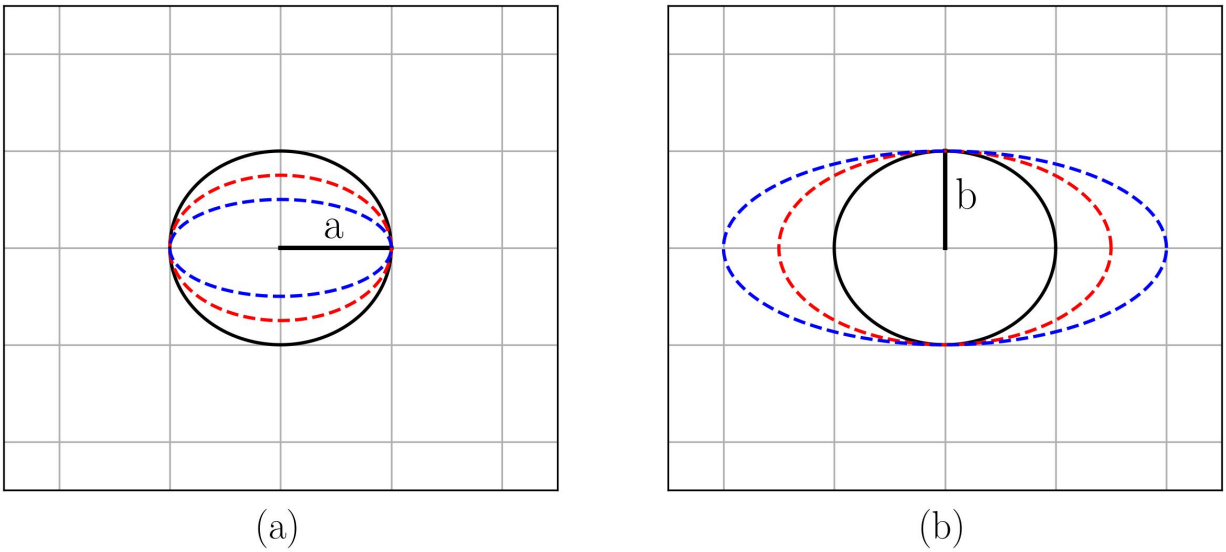

图 5：在 (a) 中，固定 a，并减小椭圆的离心率（即增大 b）。在 (b) 中，固定 b，并增大椭圆的离心率（即增大 a）。

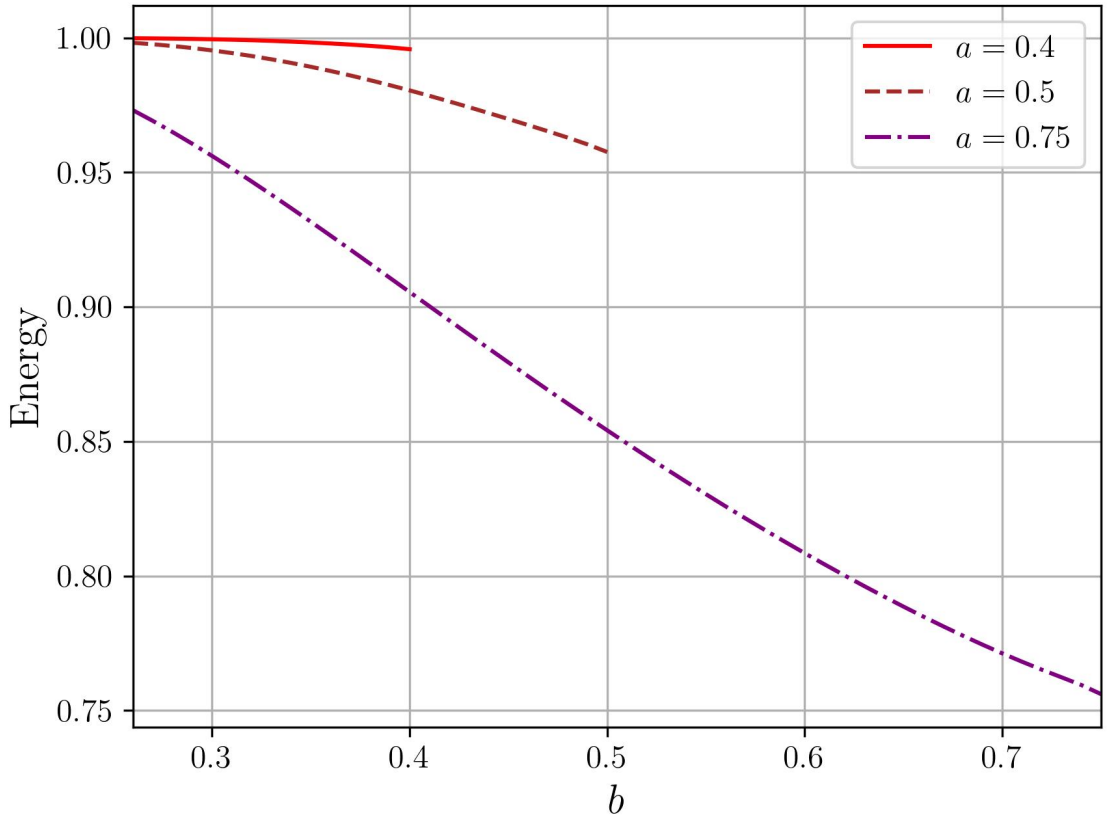

图6： $a = 0.75$的能量曲线。

当 a 变化而 b 固定为 $a < b$时，相应的能量曲线如图7所示。在此状态下，增大 a会使离心率增大，窗口的形状见图5(b)。

与先前分析的构型相比，没有观察到两种不同定性状态（抛物线型和双曲分支）之间的分岔。对于所有考察的b取值，能量曲线都呈现相同的定性行为：先急剧下降，随后转为渐近双曲分支。当 b 较小时，例如图8所示的 $b = 0.26$ ，能量非常接近均匀狄利克雷波导的基传播阈值，且只有在 a超过临界阈值（约为0。5）后才会迅速下降。从谱角度看，这表明对于固定的 b，从本质谱底部出现的离散特征值会随着 a 增大而迅速降低，随后收敛至一个极限值，形成平台。关于a 的渐近行为由如下形式的双曲分支描述： $y = C_b$ ，其中 C_b 表示与参数 b相关联的渐近水平。此外， C_b 是 b的递减函数，反映了极限特征值对几何参数的单调依赖关系。

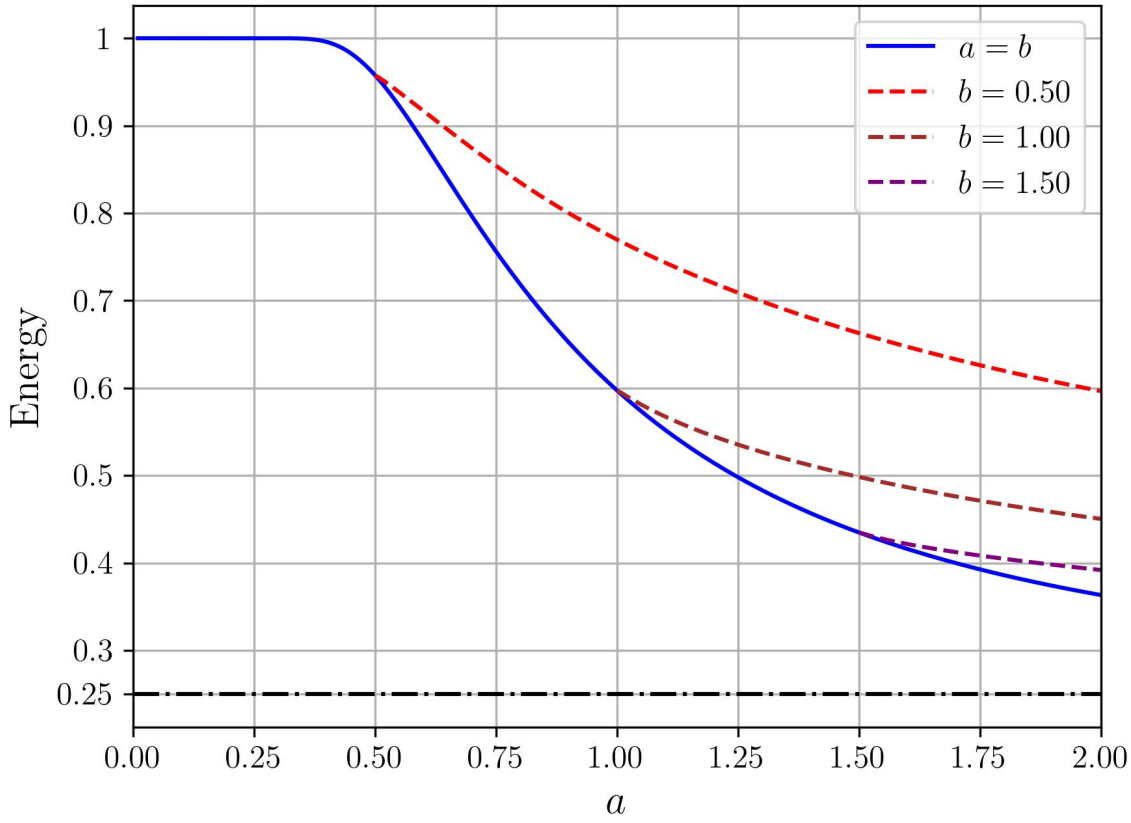

图7： b固定时的能量曲线。

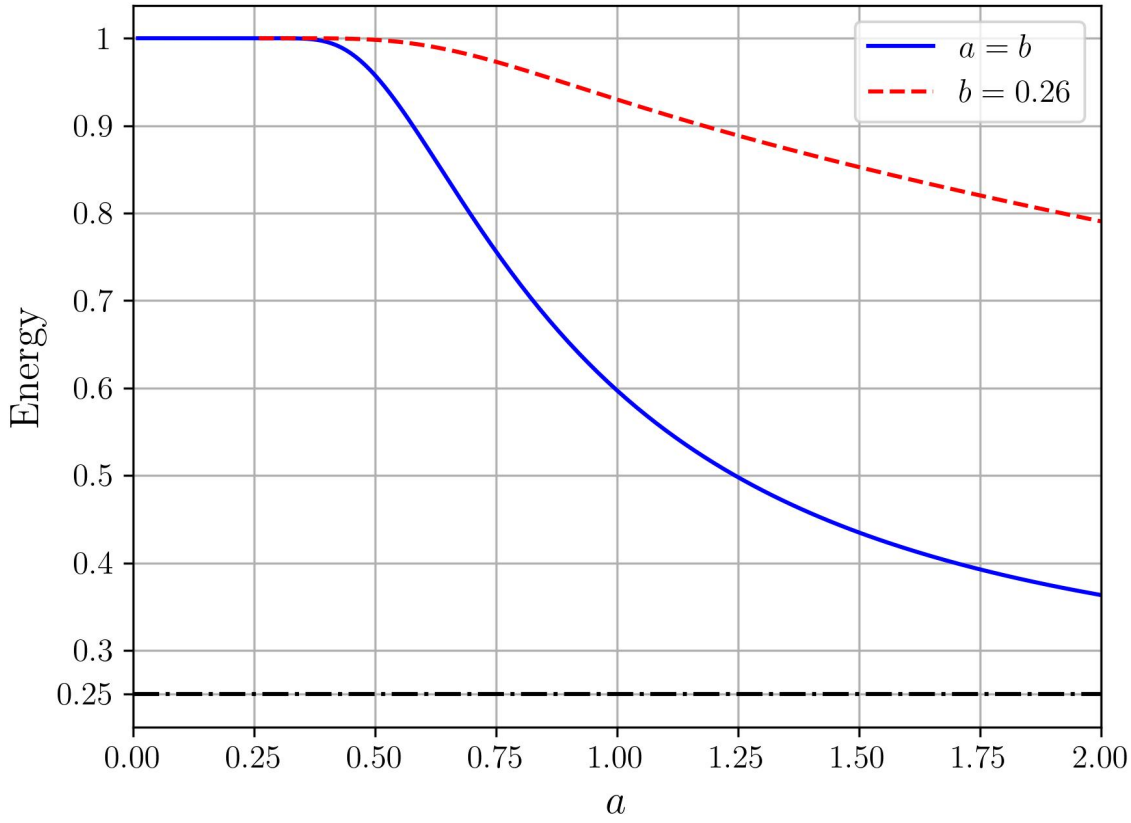

图 8： b较小时的能量曲线。

当 b 固定时，能量随椭圆参数 r 变化的曲线如图 9 所示，该图表明能量随着窗口离心率的增加而降低。

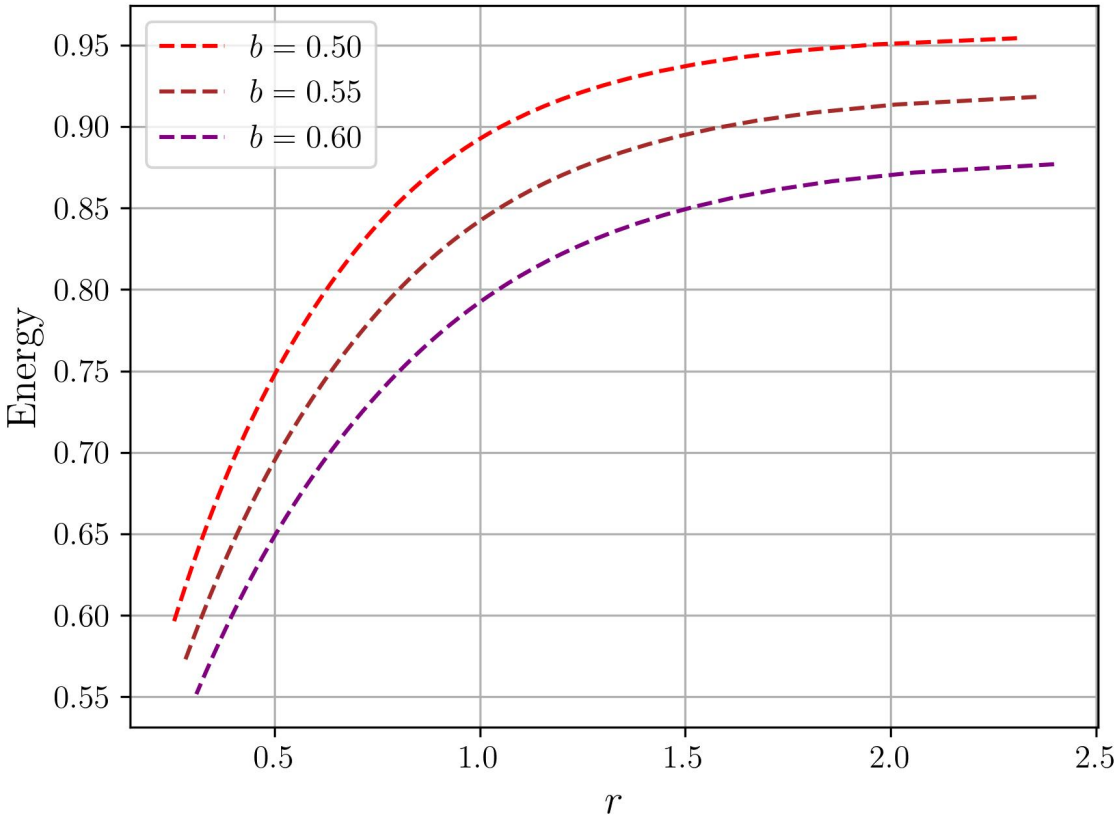

图 9： b 固定时，能量曲线随椭圆坐标的变化。

5 结论

我们的分析证实，无论尺寸如何，带有椭圆形窗口的狄利克雷波导中都存在束缚态。其能量（特征值）低于本质狄利克雷谱。我们还利用数值方法解释了能量曲线的定性行为。

本研究重点分析了基态能量的性质。进一步研究相应波函数和高阶态的性质将很有意义。由于数值计算面临挑战，这项研究留待未来开展。

参考文献

[1] *M. Abramowitz* 和 *I. A. Stegun*：《数学函数手册：公式、图表和数学表格》，纽约：*Dover*（*1972*年）。[2] *A. S. Bagmutov*、*H. Najar*、*I. Y. Popov* 和 *I. F. Melikhov*：存在外场时带诺伊曼窗口的量子波导的离散谱，*Phys. Chem. Math., 2022*年, *(13) (2), 156–163*。[3] *D. Borisov* 和 *R. Gadyl'shin*：关于具有频繁交替边界条件的拉普拉斯算子的谱，*Teor. Mat. Fiz. (118) 347*（俄文）（*1999*年）。[4] *D. Borisov*：具有频繁交替边界条件的圆柱体中拉普拉斯算子特征元的渐近行为，*C. R. Acad. Sci. Paris Ser. II (329)* 第 *717–721* 页（*2001*年）。[5] *D. Borisov*：关于拉普拉斯算子频繁交替边界条件类型的模型边值问题，*Asymptotic Analysis (35) 1*（*2003*年）。[6] *D. Borisov*：具有频繁交替非周期边界条件的拉普拉斯算子特征元的渐近行为与估计，*Izv. RAN Ser. Mat. (67) (6) 23*（俄文）（*2003*年）。[7] *D. Borisov*、*P. Exner* 和 *R. Gadyl'shin*：二维条带中的几何耦合阈值，*J. Math. Phys. (43) 2.* 第 *6265–6278* 页（*2002*年）。[8] *D. Borisov* 和 *P. Exner*：一对相距较远的窗口中波导束缚态的指数劈裂，*J. Phys. A 37 n*° 10，第 *3411–3428* 页（*2004*年）。[9] *D. Borisov D*、*T. Ekholm* 和 *H. Kovaˇr´ık*：具有混合边界条件的波导中磁性薛定谔算子的谱，*Ann. Henri Poincar´e (6) 327*（*2005*年）。[10] *W. Bulla*、*F. Gesztesy*、*W. Renger* 和 *B. Simon*：量子波导中的弱耦合束缚态，*Proc. Amer. Math. Soc. 125*，第 *5* 期，*1487–1495*（*1997*年）。[11] *J. S. Dowker*、*K. Kirsten K* 和 *P. B. Gilkey*：关于诺伊曼/狄利克雷问题热迹渐近展开的性质，*Int. J. Math. (12)* 第 *505–517* 页（*2001*年）。[12] *T. A. Driscoll* 和 *H. P. W. Gottlieb*：非简谐振子特征值与特征函数微扰级数的求和，*Phys. Rev. E (68) 016702*（*2003*年）。[13] *P. Duclos* 和 *P. Exner*：二维和三维量子波导中的曲率诱导束缚态，*Rev. Math. Phy. (37)* 第 *4867–4887* 页（*1989*年）。[14] *P. Exner*、*P. ˇSeba*：通过边界窗口侧向耦合的量子波导中的束缚态与散射，*J. Math. Phys. (30) n*° 10，第 *2574* 页（*1989*年）。[15] *P. Exner*、*P. ˇSeba*、*M. Tater* 和 *D. Vanˇek*：通过边界窗口侧向耦合的量子波导中的束缚态与散射，*J. Math. Phys. (37) n*° 10，第 *4867–4887* 页（*1996*年）。[16] *P. Exner*、*S. A Vugalter*：通过狭窄窗口侧向耦合的量子波导中束缚态的渐近估计，*Ann. Inst. H. Poincare,(65), No.1,* 第 *109–123* 页（*1996*年）。

[17] P. Exner P 和 S. A. Vugalter：窗口耦合狄利克雷条带与层中束缚态的渐近估计，Jour. Phy. A (30) 7863（1997年）。[18] Gortinskaya L V、Popov I Y、Tesovskaya E S 和 Uzdin V M：超薄磁性层多层结构中的电子输运，Physica E (36) 第 12–16 页（2007年）。[19] D. S. Grebenkov、B.T. Nguyen：拉普拉斯算子特征函数的几何结构，SIAM REVIEW：工业与应用数学学会 (55)，第 4 期，第 601–667 页（2013年）。[20] A. Grigis 和 J. Sj¨ ostrand：微分算子的微局部分析，剑桥大学出版社（1994年）。[21] H. Hezari、S. Zelditch：椭圆域的逆谱刚性，Inventiones Mathemati- cae (196)，第 1–80 页（2014年）。[22] Y. Hirayama、A. D. Wieck、T. Bever、vonK. Klitzing 和 K. Ploog：由弹道窗口耦合的平行面内栅控导线，Phys. Rev. B (46) 4035（1992年）。[23] D. Holcman 和 Z. Schuss：通过一簇小型吸收窗口的扩散逃逸，Jour. Phy. A Mathematical and Theoretical (41) 155001（2008年）。[24] N. E. Hurt：《量子线与器件数理物理》，数学及其应用 (506)，Kluwer Academic，Dordrecht（2000年）。[25] D. Jakobson：《经典电动力学》第 3 版（纽约：威利出版社），第 3.13 节（1999年）。[26] D. Jakobson、M. Levitin、N. Nadirashvili 和 I. Polterovich：具有狄利克雷-诺伊曼混合边界条件的谱问题：等谱性及其他，J. Comp. Appl. Math. (194) 141（2006年）。[27] F. Kleespies 和 P. Stollmann：随机量子波导的利夫希茨渐近与局域化，Rev. Math. Phy. (12) 第 1345–1365 页（2000年）。[28] A. Klein；J. Lacroix 和 A. Speis, Athanasios：具有奇异势的条带上安德森模型的局域化，J. Funct. Anal. (94) n° 1，第 135–155 页（1990年）。[29] V. A. Kondrat'ev：具有圆锥点或角点区域中椭圆方程的边值问题，Trans. Moscow Math. Soc. (16)，第 227–313 页（1967年）。[30] D. Krejˇciˇrík 和 J. Kˇrížˇz：关于弯曲量子波导的谱，Publ. Res. Inst. Math. Sci (41) 第 757–791 页（2005年）。[31] M. Levitin、L.Parnovski 和 I. Polterovich：具有混合边界条件的等谱域，J. Phy. A: Math. Theo. (39) 2073（2006年）。[32] N.W. McLachlan：《马丢函数理论与应用》，牛津大学出版社（1947年）。[33] H. Najar：随机量子波导中声波的利夫希茨尾，Jour. Stat. Phy. Vol 128 No 4，第 1093–1112 页（2007年）。[34] H. Najar、S. Ben Hariz 和 M. Ben Salah：带圆盘窗口的空间量子波导的离散谱，Math. Phys. Anal. Geom. (13) 19（2010年）。[35] H Najar 和 O Olendski：带两个同心诺伊曼圆盘的狄利克雷波导的谱与局域化性质，J. Phys. A: Math. Theor. 44 305304（2001年）。[36] H. Najar：具有随机边界条件的量子波导的利夫希茨尾，Math. Phys. Anal. Geom. (22), 17（2019年）。[37] S. A. Nazarov 和 M. Specovius-Neugebauer：具有圆柱形出口区域中诺伊曼拉普拉斯算子的自伴扩张，Commu. Math. Phy. 185 第 689–707 页（1997年）。[38] O. Olendski 和 L. Mikhailovska：均匀磁场中具有狄利克雷与诺伊曼混合边界条件的直量子波导，Jour. Phy. A: Mathematical and Theoretical (40) 4609（2007年）。[39] O. Olendski 和 L. Mikhailovska：均匀磁场中具有狄利克雷与诺伊曼混合边界条件的弯曲平面波导的解析与数值研究，Phy. Rev. B, (77) 174405（2008年）

[40] R. E. Prange、E. Ott、T. M. Antonsen、B. Georgeot 和 R. Bl¨umel：射线分裂与量子混沌Phys. Rev. E(**53**) 207（1996年）。[41] M. Reed 和 B. Simon：现代数学物理方法第 IV 卷：算子分析。Academic Press, （1978年）。[42] R. Seeley：*Zaremba*问题的迹展开 Commun. Partial Differ. Equ. (**27**)2403（2002年）。[43] J. Wiersig：量子化障碍台球的谱性质2002 Physical Review E(**65**)046217（2002年）。[44] G. N. Watson：贝塞尔函数理论论著剑桥大学出版社。[45] S. Zaremba：关于一个混合问题 `与 `拉普拉斯 ´方程有关克拉科夫国际科学院通报 314（1910年）。