

ПРЯМЫЕ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ В МОДЕЛИ КВАНТОВЫХ ГРАФОВ

И. С. Лобанов, Е. С. Трифанова

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

lobanov.igor@gmail.com, etrifanova@gmail.com

PACS 72.80.Vp, 73.21.Nb, 73.22.Dj, 73.22.Pr, 73.63.Nm

В статье дается подробное изложение методов решения спектральной и транспортной задачи для квантовых графов. Даются практические рецепты нахождения энергии π -электронов и вольт-амперных характеристик для ароматических соединений в рамках модели квантовых графов. Предлагаются приемы, увеличивающие точность численного решения перечисленных задач, а также описываются возможности для распараллеливания вычислений. Также в статье предлагается основанный на генетических алгоритмах способ решения обратных задач, важных для нанотехнологий.

Ключевые слова: Квантовые графы, электронные свойства, модели ароматических соединений, алгоритмы суперкомпьютерного моделирования.

1. Введение

Одним из наиболее перспективных направлений научных исследований является изучение углерода, что подтверждается присуждением трех Нобелевских премий: по химии 1960 года Уилларду Либби «за введение метода использования углерода-14 для определения возраста в археологии, геологии, геофизике и других областях науки», по химии 1996 года Роберту Кёрлу, Гарольду Крото и Ричарду Смолли «за открытие фуллеренов», по физике 2010 года Константину Новосёлову и Андрею Гейму «за передовые опыты с двумерным материалом — графеном».

Следует отметить, что не существует алгоритма, позволяющего быстро предъявить квантовомеханическую систему, обладающие произвольными заданными свойствами. Поэтому для поиска системы с требуемыми свойствами естественно проводить отбор по желаемому критерию среди всех систем. Так как создание системы воплотить само по себе является сложной задачей, для определения свойств системы на первичном этапе применяются математическое и компьютерное моделирование.

Наиболее близкими к физической сути являются так называемые *ab initio* методы моделирования квантовомеханических систем [16], [24], [34]. Однако прямое использование этих методов на практике сталкивается с затруднением, заключающемся в огромной вычислительной сложности задачи. Основная сложность заключена в самой квантовой механике, постулирующей экспоненциальный рост сложности вычислений с увеличением числа частиц. Даже если отделить движение электронов от движения атомов, сложность вычислений остается степенной функцией от необходимого размера базиса. Так как размер базиса является степенной функцией с показателем степени, равным размерности пространства, то сложность вычислений можно снизить, если наложить дополнительные физические естественные ограничения на положение частицы, т.е. если сделать допущение, что

под действием геометрического конфайнмента рассматриваемая частица не может покинуть подпространство (подмногообразие) меньшей размерности, чем исходное. Так модель сильной связи может рассматриваться как частный случай описываемого подхода, так как по сути сводится к ограничению возможных положений частицы положениями в окрестностях атомов [16]. В модели сильной связи размер базиса растет линейно с ростом числа атомов, что делает его хорошим кандидатом для моделирования систем со значительным (сотни тысяч) числом атомов. Во многих случаях модель сильной связи дает предсказания согласующиеся с действительностью, однако в рамках этой модели все переходы происходят по существу мгновенно, и частица во время перехода не взаимодействует с другими частями системы, что не всегда верно. Следует отметить, что гамильтониан в модели сильной связи можно интерпретировать как оператор Шредингера на подходящем дискретном графе.

В ряде случаев принято заменять исходную квантовомеханическую систему непрерывной, например, достаточно большой лист графена или слой полупроводника на подложке можно моделировать плоскостью, однослойную нанотрубку — цилиндром, проводящий канал — прямой и т. п. [27], [32], [31]. Этот класс задач сводится к изучению операторов Бельтрами–Лапласа. Вычислительная сложность уменьшается с уменьшением размерности, и в ряде случаев даже возможно полное аналитическое решение. Особый интерес представляет возможность склеить несколько таких простых кусков, чтобы получить достаточно сложную схему, что является обычным приемом в схемотехнике. Объединение систем в одну существенно меняет их свойства в квантовой механике, и прогноз этих свойств вообще говоря весьма сложен. Однако, если склейка происходит только в изолированных точках, то анализ оказывается относительно прост. Простейшим примером моделей такого рода являются квантовые графы [23], [27], [8].

Квантовые графы имеют весьма давнюю историю и применялись пионерами квантовой химии [40], [39]. Обоснование корректности их применения было дано Руденбергом и Шером [38]. Строгая математическая теория квантовых графов была разработана в последние десятилетия в работах П. Экснера и др. [23], [27]. В последнем десятилетии модель квантовых графов применялась для моделирования многих квантовых систем на основе углерода: углеродных нанотрубок, сочленений нанотрубок и т. п. [10], [23], [11], [27].

Если в квантовом графе заменить некоторые ребра или вершины произвольными многообразиями, то получившийся объект называется гибридным многообразием [8]. Например, гибридным многообразием будет цепочка касающихся сфер. Ясно, что переход к гибридным многообразиям значительно расширяет число моделируемых систем, так цепочка сфер может служить моделью соединенных фуллеренов. Заметим, что любую систему можно представить в виде объединения своих кусков, но к гибридным многообразиям будут относиться только те, в которых границы кусков состоят из изолированных точек. Ясно, что на волновых функциях, зануляющихся в точках склейки, гамильтониан на гибридном многообразии совпадает с гамильтонианом на дизъюнктивном объединении составляющих многообразие кусков. Следовательно, гибридные многообразия можно отнести к классу т. н. явнорешаемых моделей [28].

В теории явнорешаемых моделей [28], [6] предполагается, что гамильтониан интересующей нас системы получается возмущением конечного (в ряде случаев счетного) ранга простой системы, все свойства которой известны. Тогда пользуясь теорией М. Г. Крейна и более современными ее формулировками (теорией пространств граничных значений, теорией Посиликано, теорией квазиграничных троек и т. п.) анализ системы сводится к изучению семейства операторов в пространстве, размерность которого совпадает с рангом возмущения [19], [8].

Следует отметить, что исследования упомянутых систем ведется не только в рамках квантовой механики. Так спектральная теория дискретных графов находит активное применение в моделировании компьютерных сетей, обработке изображений, алгоритмах ранжирования и т. д. [26], [36]. Квантовые графы также используются для моделирования электрических, механических, акустических и др. процессов в сетях разнообразной природы [29].

Из-за относительной быстроты решения прямых задач для квантовых графов [19], [8], модель квантовых графов является хорошим кандидатом для конструирования наносистем с заданными свойствами. Заметим, что полное математическое решение обратных задач в ближайшее время вряд ли возможно, поэтому для конструирования наносистем остается использовать универсальные методы, такие как генетические алгоритмы, которые требуют многократного решения прямой задачи, что и обуславливает выбор модели наносистемы. После предварительного подбора системы генетическим алгоритмом, проверить корректность решения и уточнить его свойства можно более точными методами.

Поясним, за счет чего достигается высокая скорость решения задачи в модели квантовых графов. Основой счета является знание функций Вейля (отображений Дирихле–Неймана) для составляющих частей графа, т. е. знание функции, сопоставляющей условиям Дирихле условия Неймана приводящие к тому же решению спектральной задачи для гамильтониана. Если эти функции Вейля известны, то вычисление функции Вейля для всего гибридного многообразия сводится к решению линейной системы с числом неизвестных, равным числу точек склейки кусков. Заметим, что если некоторые куски многообразия совпадают, то вычислять функцию Вейля для них нужно только один раз, таким образом, например, для квазифракталов вычисление функции Вейля имеет линейную сложность по номеру генерации, хотя число кусков системы растет экспоненциально. Аналогично для систем, имеющих абелевы группы периодичности, сложность вычислений линейна по порядку группы. Таким образом значительный выигрыш достигается, если система имеет несколько одинаковых частей, что является общим местом при моделировании систем, получаемых из графена [16], [15].

Для использования всей вычислительной мощи суперкомпьютера в настоящее время необходимо использование хорошо распараллеливаемых алгоритмов. В случае модели гибридных многообразий распараллеливание возможно по следующим направлениям, кроме распараллеливания обычных матричных операций.

Во-первых, вычисление функции Вейля для гибридного многообразия состоит из вычисления функций Вейля для кусков многообразия с последующим решением вспомогательной системы, в которую входит функции Вейля частей. Т.е. алгоритм вычисления функции Вейля полностью укладывается в стандартную схему map-reduce, являющуюся классической моделью распределенных вычислений.

Во-вторых, для вычисления уровней энергии необходимо искать нули некоторых вспомогательных функций, выражающихся через функции Вейля, причем известно, что нули заключены на интервалах, ограниченных уровнями энергии частей гибридного многообразия. Тем самым вычисления для каждого интервала энергии производятся независимо, допуская тривиальное распараллеливание.

В-третьих, вычисление собственных функций для данного уровня энергии производится сверху вниз, вычисляя сначала граничные условия поочередно для каждого уровня разбиения многообразия и затем восстанавливая значения волновой функции во внутренних точках, путем вычисления значений функций Грина для кусков. Таким образом вычисление значений собственной функции на каждом из кусков можно производить независимо, т.е. вычисления легко распараллеливаются.

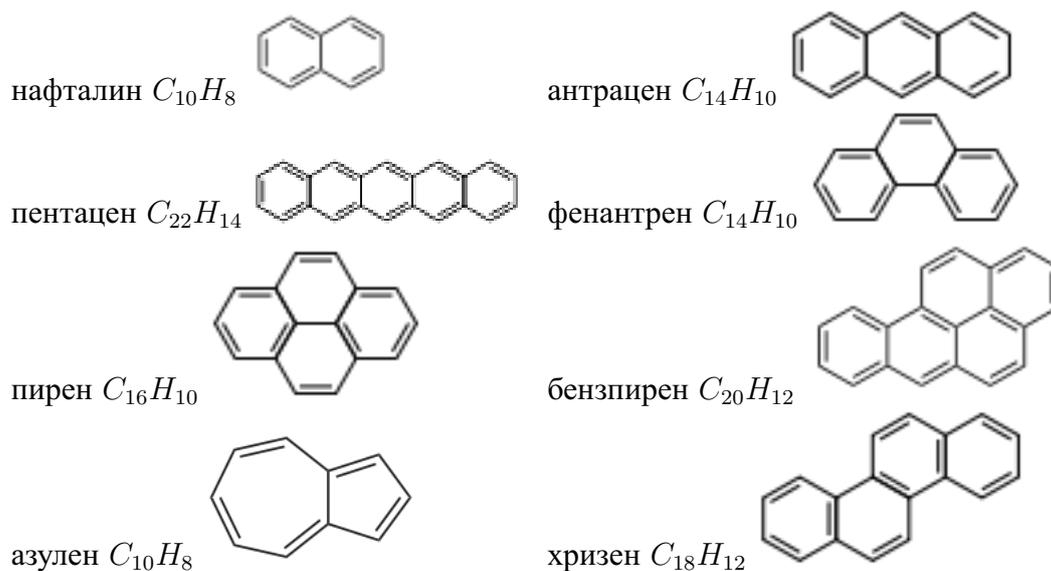


Рис. 1. Примеры ароматических соединений

Наконец, предлагаемый в данной статье генетический алгоритм поиска систем с заданными свойствами изначально ориентирован на распределенные вычисления, так как вычисления свойств каждого из членов популяции производится независимо и одновременно.

Таким образом, предлагаемый подход позволяет изучать системы с миллионами атомов даже на обычном компьютере при специальном конструировании системы со множеством подобных частей, а также позволяет изучать произвольные большие ансамбли частиц на суперкомпьютере, опираясь на параллельные вычисления.

Особый интерес представляет влияние электромагнитного поля на свойства системы. Оказывается, что это влияние легко учитывается в рамках парадигмы гибридных многообразий. В работах [25], [37] демонстрируется, каким образом магнитное поле добавляется в систему, и показан пример расчета для постоянного однородного магнитного поля. В работе [10] предьявлены методы изучения влияния электрического поля, в частности вычисляются вольт-амперные характеристики для модели квантового графа.

Системы на основе графана являются новой областью в теории моделей квантовых графов. Однако мы предполагаем, что хорошее приближение может быть получено при адекватном выборе потенциала на ребрах, отвечающих C–N связям, что требует экспериментальной проверки.

Решение прямых задач, описываемое в настоящей статье, может быть автоматизировано с помощью программной библиотеки, разработанной одним из авторов статьи [18].

2. Модель квантовых графов для ароматических соединений

Первое обоснование квазиодномерности движения π -электронов в ароматических соединениях (см. рис. 1) было дано в работе [2]. В рамках предложенного подхода каждая химическая связь заменяется на узкую трубку, в которой движется электрон, и из которой он не может уйти. Считая ширину трубки пренебрежимо малой, получаем, что электрон движется по сети из одномерных проводников. Математически данная процедура может

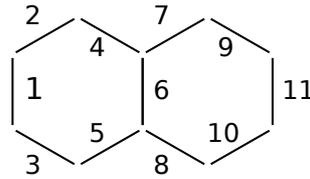


Рис. 2. Разбиение графа на ребра и выбор нумерации

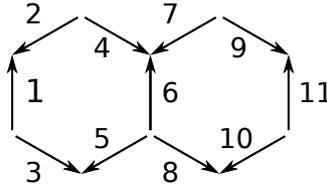


Рис. 3. Выбор ориентации ребер

быть обоснованна предельным переходом, проделанным в работах [4]. Практическое применение этого подхода для моделирования систем на основе графена с помощью квантовых графов продемонстрировано в работах [9], [10], [11] и др.

В настоящем разделе мы напоминаем математические конструкции, необходимые для анализа на квантовых графах. Описание других формализмов и ряда деталей можно найти, например, по ссылкам из обзора [3]. Для наглядности изложения будем иллюстрировать изложение на примере нафталина.

Сначала граф представляется в виде объединения семейства ребер, которые необходимо некоторым произвольным образом занумеровать (см. рис. 2). Обозначим множество индексов через E . отождествим каждый отрезок $e \in E$ с интервалом $[0, l_e]$. Чтобы данная процедура была однозначной, укажем, какому концу соответствует 0. Для этого фиксируем ориентацию на графе и считаем, что начало каждого ребра соответствует нулю (рис. 3). Отметим, что ориентация выбирается произвольно и не влияет на физические свойства, однако не может изменяться в процессе вычислений.

Пусть φ - волновая функция всего, графа, а φ_e - ее сужение на ребро e . Гамильтониан H_e действует на φ_e как оператор Шредингера:

$$H_e \varphi_e(x) = -\varphi_e''(x) + V_e(x) \varphi_e(x),$$

и формально определен на функциях из C_0^∞ , $x \in [0, l_e]$ обозначает локальную координату в смысле указанного выше соответствия ребер и интервалов. Определение явного (точного) вида потенциала V_e составляет отдельную проблему, однако в большинстве работ, включая [2], потенциал на ребрах при отсутствии внешних полей полагается равным нулю.

Отметим, что мы определили наш оператор только на гладких функциях с компактным носителем, т.е. все рассмотренные выше функции обращались в нуль в некоторых окрестностях всех концов ребер. Формально такой оператор S определен как прямая сумма сужений H_e на функции из $C_0^\infty [0, l_e]$ по всем ребрам $e \in E$. Искомый гамильтониан H есть самосопряженный оператор, являющийся расширением оператора S [3]. Чтобы зафиксировать оператор H единственным образом, необходимо задать граничные условия, которым удовлетворяют волновые функции в узлах (вершинах) графа. Причем согласно принципу локальности граничные условия могут связывать только ребра, соединенные в вершине.

Согласно общей теории для задания граничных условий на одном ребре нужна пара операторов граничных значений Γ_e^0, Γ_e^1 , сопоставляющих функции на ребре e пару комплексных чисел. В случае гладкого потенциала V_e (например, $V_e = 0$) в качестве операторов граничных значений берут [3]

$$\Gamma_e^0 f_e = \begin{pmatrix} f_e(0) \\ f_e(l_e) \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \Gamma_e^1 f_e = \begin{pmatrix} f_e'(0) \\ -f_e'(l_e) \end{pmatrix},$$

т.е. $\Gamma_e^0 f_e = 0$ задает условие Дирихле, а $\Gamma_e^1 f_e = 0$ — условие Неймана на ребре e . На практике условия Дирихле или Неймана встречаются редко, так как означают, что ребро изолировано от всех остальных.

Более употребительными являются условия Кирхгофа вида:

$$f_{e_1}(v) = f_{e_2}(v) = \dots = f_{e_n}(v),$$

$$\sum_{k=1}^n \partial f_{e_k}(v) = 0,$$

где e_1, \dots, e_n — ребра, имеющие общую вершину v , $f_e(v)$ — значение на ребре e в вершине v , $\partial f_e(v)$ — внешняя производная f в вершине v :

$$\partial f_e(v) = \begin{cases} -f_e'(0), & \text{если } v \text{ — начало } e; \\ f_e'(l_e), & \text{если } v \text{ — конец } e. \end{cases}$$

Иногда рассматриваются обобщенные условия Кирхгофа:

$$f_{e_1}(v) = f_{e_2}(v) = \dots = f_{e_n}(v) = \alpha \sum_{k=1}^n \partial f_{e_k}(v)$$

и магнитные условия Кирхгофа (см. главу 7)

$$e^{i\theta_1} f_{e_1}(v) = e^{i\theta_2} f_{e_2}(v) = \dots = e^{i\theta_n} f_{e_n}(v),$$

$$\sum_{k=1}^n e^{i\theta_k} \partial f_{e_k}(v) = 0,$$

для некоторых $\theta_k \in [0, 2\pi]$.

Обозначим через $\Gamma_e^j f(v)$ компоненту вектора $\Gamma_e^j f$, отвечающую значению в вершине v , т.е. для гладкого V_e

$$\Gamma_e^0 f_e(v) = \begin{cases} f_e(0), & \text{если } v \text{ — начало } e; \\ f_e(l_e), & \text{если } v \text{ — конец } e; \end{cases}$$

$$\Gamma_e^1 f_e(v) = \begin{cases} -f_e'(0), & \text{если } v \text{ — начало } e; \\ f_e'(l_e), & \text{если } v \text{ — конец } e. \end{cases}$$

Тогда условия Кирхгофа записываются так:

$$\begin{cases} \Gamma_{e_1}^0 f(v) = \Gamma_{e_2}^0 f(v) = \dots = \Gamma_{e_n}^0 f(v); \\ \sum_{k=1}^n \Gamma_{e_k}^1 f(v) = 0. \end{cases}$$

В таком виде условия Кирхгофа можно распространить на случай потенциала V с особенностями. В наиболее общем виде условие в вершине v имеет вид

$$A_v \Gamma^0 f(v) = B_v \Gamma^1 f(v),$$

где

$$\Gamma^0 f(v) = \begin{pmatrix} \Gamma_{e_1}^0 f(v) \\ \dots \\ \Gamma_{e_n}^0 f(v) \end{pmatrix}, \quad \Gamma^1 f(v) = \begin{pmatrix} \Gamma_{e_1}^1 f(v) \\ \dots \\ \Gamma_{e_n}^1 f(v) \end{pmatrix}$$

– вектора граничных значений в вершине v . Здесь e_1, \dots, e_n – все ребра инцидентные вершине v , причем если ребро – петля, его нужно считать дважды.

Отметим, что n равно кратности вершины v и $\Gamma^0 f(v), \Gamma^1 f(v) \in \mathbb{C}^n$.

A_v и B_v – матрицы размером $n \times n$ такие, что

- (1) ранг матрицы, полученной приписыванием A_v к B_v слева, равен n ;
- (2) $A_v B_v^* = B_v A_v^*$, где $*$ означает эрмитово сопряжение.

Для условий Кирхгофа матрицы A_v и B_v можно записать различными способами, однако лучше всего их записывать в следующем симметричном виде:

$$A_v = \begin{pmatrix} n-1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & n-1 & \dots & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & -1 & \dots & n-1 \end{pmatrix}; \quad B_v = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Выпишем граничные условия Кирхгофа для модели молекулы нафталина (так как длины всех ребер равны, то будем считать $l_e \equiv 1$):

$$\begin{cases} f_1(0) = f_3(0); & f'_1(0) + f'_3(0) = 0; \\ f_1(1) = f_2(1); & f'_1(1) + f'_2(1) = 0; \\ f_3(1) = f_5(1); & f'_3(1) + f'_5(1) = 0; \\ f_2(0) = f_4(0); & f'_2(0) + f'_4(0) = 0; \\ f_5(0) = f_6(0) = f_8(0); & f'_5(0) + f'_6(0) + f'_8(0) = 0; \\ f_4(1) = f_6(1) = f_7(1); & f'_4(1) + f'_6(1) + f'_7(1) = 0; \\ f_7(0) = f_9(0); & f'_7(0) + f'_9(0) = 0; \\ f_8(1) = f_{10}(1); & f'_8(1) + f'_{10}(1) = 0; \\ f_9(1) = f_{11}(1); & f'_9(1) + f'_{11}(1) = 0; \\ f_{11}(0) = f_{10}(0); & f'_{11}(0) + f'_{10}(0) = 0. \end{cases}$$

Как мы видим для ручного счета система получается довольно большой, хотя молекула простая. Однако в данном примере счет можно упростить, заметив, что в вершине кратности 2 граничные условия Кирхгофа равносильны условию непрерывности, поэтому вершины кратности 2 можно исключить, объединив несколько ребер в одно (возможно, при этом необходимо изменить ориентацию ребер).

Так, для нафталина можно объединить ребра 5–3–1–2–4 и ребра 7–9–11–10–8, оставив тем самым только две вершины кратности 3.

В матричном виде граничные условия можно записать так

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1(0) \\ f_3(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f'_1(0) \\ -f'_3(0) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_5(0) \\ f_6(0) \\ f_8(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f'_5(0) \\ -f'_6(0) \\ -f'_8(0) \end{pmatrix}.$$

Далее предлагается альтернативный подход, основанный на функции Вейля.

Рассмотрим ребро e и зафиксируем на нем граничные условия $F_e = \Gamma_e^0 f \in \mathbb{C}^2$. В силу единственности решения f дифференциального уравнения $H_e f_e = \xi f_e$ с граничными условиями $\Gamma_e^0 f = F_e$, можно корректно определить

$$Q_e(\xi)F_e = \Gamma_e^1 f.$$

Отображение $Q_e(\xi) : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ — линейно и корректно определено для всех $\xi \in \mathbb{C}$, при которых решение краевой задачи существует и единственно.

В силу определений матрица $Q(\xi)$ существует для всех ξ кроме спектра Дирихле σ_D , где

$$\sigma_{D,e} = \{ \xi : \exists f_e \neq 0 : H_e f_e = \xi f_e, \Gamma_e^0 f = 0 \}.$$

Если же $\xi \in \sigma_{D,e}$, то $\Gamma_e^0 f = 0$ для всякого решения f уравнения $H_e f_e = \xi f_e$.

Т.о. всегда можно подобрать функции $D_e(\xi)$ и $N_e(\xi)$ такие, что

$$D_e(\xi)\Gamma_e^0 f_e = N_e(\xi)\Gamma_e^1 f_e \quad \text{для} \quad \forall f_e : H_e f_e = \xi f_e.$$

Отметим, что в приложениях функции $D_e(\xi)$ и $N_e(\xi)$ можно выбрать аналитическим по ξ . Например, для гладкого потенциала V_e существует фундаментальное решение уравнения

$$\begin{cases} f_e(x) = \theta_e(x)f_e(0) + \varphi_e(x)f'_e(0); \\ \theta_e(0) = \varphi'_e(0) = 1, \\ \theta'_e(0) = \varphi_e(0) = 0. \end{cases}$$

Откуда

$$N \begin{pmatrix} -f'_e(0) \\ f'_e(l_e) \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} f_e(0) \\ f_e(l_e) \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad N = \begin{pmatrix} \varphi_e(l_e) & 0 \\ 0 & \varphi_e(l_e) \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \theta_e(l_e) & -1 \\ -1 & \varphi'_e(l_e) \end{pmatrix}.$$

Так как $\varphi, \theta, \varphi', \theta'$ аналитически зависят от ξ , то матрицы N и D тоже аналитически зависят от ξ . В случае четного потенциала $V(x) = V(l_e - x) \forall x$ справедливо $\theta_e(l_e) = \varphi'_e(l_e)$. Например для $V \equiv 0$ имеем

$$\theta_e(l_e) = \varphi'_e(l_e) = \cos(\sqrt{-\xi}l_e), \quad \varphi_e(l_e) = \frac{\sin(\sqrt{-\xi}l_e)}{\sqrt{-\xi}}.$$

Заметим, что полученная функция φ_e аналитична на римановой поверхности для $z \mapsto \sqrt{z}$.

При $l \rightarrow 0$ справедливо $f(0) = f(l), f'(0) = f'(l)$, т.к.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f'(0) \\ f'(l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(0) \\ f(l) \end{pmatrix}.$$

При $V = 0$ имеем $\varphi(x) = \frac{\sin \sqrt{-\xi}x}{\sqrt{-\xi}}, \theta(x) = \varphi'(x) = \cos \sqrt{-\xi}x$.

Однако условие

$$\begin{pmatrix} \varphi & 0 \\ 0 & \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f'(0) \\ f'(l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta & -1 \\ -1 & \varphi' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(0) \\ f(l) \end{pmatrix}$$

дает верный ответ при $l \neq 0$. При $l \rightarrow 0$ из $f \in C^1$ должно быть

$$f(0) = f(l), \quad f'(0) = f'(l).$$

Для всех $l \geq 0$ верный ответ дают условия

$$N \begin{pmatrix} -f'(0) \\ f'(l) \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} f(0) \\ f(l) \end{pmatrix},$$

где

$$N = \begin{pmatrix} e^{l\sqrt{-\xi}/2} & e^{-l\sqrt{-\xi}/2} \\ e^{-l\sqrt{-\xi}/2} & e^{l\sqrt{-\xi}/2} \end{pmatrix}, \quad D = \sqrt{-\xi} \begin{pmatrix} e^{l\sqrt{-\xi}/2} & -e^{-l\sqrt{-\xi}/2} \\ -e^{l\sqrt{-\xi}/2} & e^{l\sqrt{-\xi}/2} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Покажем, что уравнение

$$H_e f_e = \xi f_e \quad (4)$$

можно заменить на эквивалентное уравнение

$$D_e \Gamma_e^0 f_e = N_e \Gamma_e^1 f_e \quad (5)$$

на вектора $\Gamma_e^0 f_e, \Gamma_e^1 f_e$. Мы уже показали, что для каждого решения f уравнения (4) выполняется условие (5). Пусть теперь для некоторых векторов $F^0 = \Gamma_e^0 f_e$ и $F^1 = \Gamma_e^1 f_e$ выполняется (5). Тогда для $\xi \notin D_e$ в силу существования и единственности решения дифференциального уравнения можно найти решение f уравнения (4), удовлетворяющее $F^0 = \Gamma_e^0 f_e$, причем для этого f выполняется $F^1 = \Gamma_e^1 f_e$. Аналогично для $\xi \in D_e$ существует и единственное решение f уравнения (4), удовлетворяющее $F^1 = \Gamma_e^1 f_e$, причем выполняется $F^0 = \Gamma_e^0 f_e$. Значит (4) и (5) равносильны, и существует отображение $\begin{pmatrix} F^0 \\ F^1 \end{pmatrix} \rightarrow f$, являющееся биекцией между пространствами решений (5) и (4). Таким образом систему дифференциальных уравнений (2) мы заменяем на системы

$$\begin{cases} D_e F_e^0 = N_e F_e^1 & \forall e \in E; \\ A_e F^0(v) = B_e F^1(v) & \forall v \in V, \end{cases} \quad (6)$$

где используются обозначения $F_e^j = \Gamma_e^j f, F^j(v) = \Gamma^j f(v), j = 0, 1$. Отметим, что F_e^j и $F^j(v)$ — это разные обозначения для одного вектора, координаты которого упорядочены по-разному. В отличие от системы (2), система (6) имеет конечный размер, равный удвоенному числу ребер. Однако в отличие от (2) система (6) не является линейной, т.е. для нее не подходит обычный способ поиска собственных значений.

Далее рассматривается один из способов эффективного решения системы (6). Составим векторы F^j из всех значений $F_e^j, e \in E$ (или $F^j(v), v \in V$), занумерованных каким либо подходящим образом, причем нумерации для $j = 0$ и $j = 1$ должны совпадать. Определим матрицы D, N и A, B таким образом, что

$$D_e F_e^0 = N_e F_e^1 \quad \forall e \quad \Leftrightarrow \quad DF^0 = NF^1$$

и

$$A_v F^0(v) = B_v F^1(v) \quad \forall v \quad \Leftrightarrow \quad AF^0 = BF^1.$$

Из альтернативы Фредгольма ясно, что матричное решение (6) существует, если и только если

$$\det \begin{pmatrix} A & B \\ N & D \end{pmatrix} = 0.$$

Т.е. $\xi \in \text{spec } H \Leftrightarrow \det \begin{pmatrix} A & B \\ N & D \end{pmatrix} = 0$ и вопрос нахождения $\text{spec } H$ сводится к нахождению нулей функции $d(\xi) = \det \begin{pmatrix} A & B \\ N & D \end{pmatrix}$. Как известно, зависимость определителя d от ξ аналитическая, однако она слишком сложна, чтобы быстро находить нули. Перепишем систему (6) для случая существования N^{-1} :

$$\begin{cases} AF^0 = BF^1; \\ NF^1 = DF^0. \end{cases} \quad \begin{cases} AF^0 = BN^{-1}DF^0; \\ F^1 = N^{-1}DF^0. \end{cases} \quad \Rightarrow \quad (A - BN^{-1}D)F^0 = 0.$$

Значит, решение существует только при $\det(A - BN^{-1}D) = 0$. Аналогичное уравнение для случая существования D^{-1} : $\det(AD^{-1}N - B) = 0$. Функция $Q(\xi) = N^{-1}D$ называется функцией Вейля. Она обладает свойством

$$\frac{\partial Q}{\partial \xi} \geq 0. \quad (7)$$

Так как матрица $Q(\xi)$ самосопряженная для вещественных ξ , то для нее есть полный набор вещественных собственных значений $\mu_k(\xi)$, причем в силу (7) функции $\mu_k(\xi)$ локально монотонно возрастают. Так как N и D аналитические функции переменной ξ , то $Q(\xi)$ также аналитична за исключением точек ξ таких, что $\det N(\xi) = 0$, т.е. $\xi \in \sigma_D$. Т.о. Q имеет только изолированные особенности, которые согласно общей теории являются полюсами первого порядка. Следовательно, функции μ_k обладает теми же особенностями, что и Q . Получаем, что функции $\mu_k(\xi)$ — непрерывные монотонно возрастающие функции на каждом интервале, не содержащем точек из σ_D , которые либо имеют бесконечный предел в точке из σ_D , либо непрерывны и гладко продолжаются на следующий интервал. Это свойство позволяет численно находить решение ξ методами дихотомии, секущей, Ньютона и т.п.

Заметим, что без ограничения общности можно считать один из операторов A или B положительно определенным. Рассмотрим случай положительно определенного B . Тогда функция $W(\xi) := A - BQ(\xi)$ удовлетворяет

$$\frac{\partial W}{\partial \xi} \geq 0, \quad (8)$$

и имеет полюса в тех же точках, где $Q(\xi)$. Тогда для W существует полное семейство собственных значений $\nu_k(\xi)$, которые монотонно возрастают, имеют те же особенности, что и $\mu_k(\xi)$ (см. рис. 4). Так как $\xi \in \text{spec } H \Leftrightarrow \exists k : \nu_k(\xi) = 0$, то анализ $\text{spec } H$ равносильен анализу ν_k .

Отметим еще одно свойство:

$$Q^*(\xi) = Q(\bar{\xi}) \quad \text{для } \forall \xi \in \mathbb{C}. \quad (9)$$

4. Связь с дискретными графами. Модель сильной связи

Весьма популярной простой моделью является модель нахождения электронного спектра для твердых тел. Данная модель сводится к исследованию спектра дискретных графов. В настоящем разделе мы покажем, как можно включить модель сильной связи и спектральную задачу для дискретных графов в общую схему исследования квантовых графов.

Гамильтониан сильной связи действует на функцию, заданную в узлах (атомах); обозначим ее $v \rightarrow t_v$. Гамильтониан задается выражением

$$H^t t_v = (\deg v) \cdot t_v - \sum_{v' \sim v} t_{v'},$$

где сумма берется по всем соседям v' вершины v . Т.е. спектральное уравнение имеет вид

$$at_v - b \sum_{v'} t_{v'} = \xi t_v.$$

Зададим такой же оператор подходящим выбором A , B , N и D . Зафиксируем условия Кирхгофа. Тогда можно положить $f_e(v) = t_v$ для всех ребер e , содержащих v , и

$$\sum_{e: v \sim e} f'_e(v) = \alpha t_v.$$

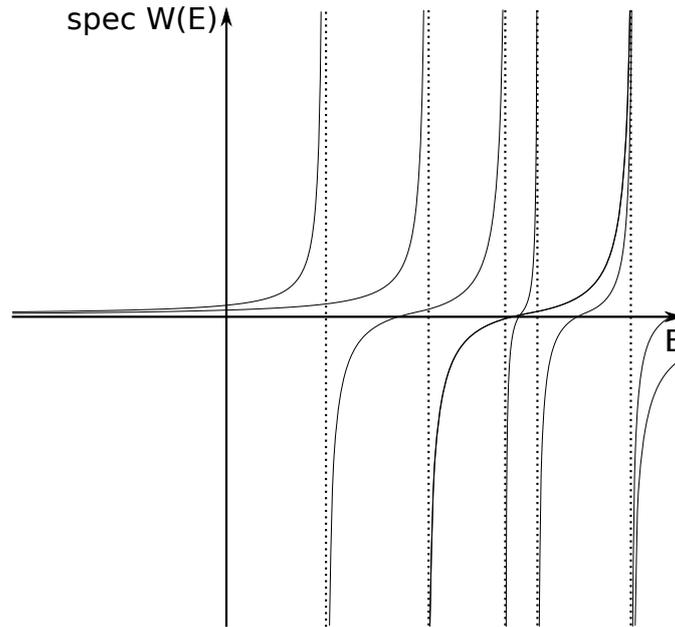


РИС. 4. Поведение двух собственных значений матрицы Вейля. Собственные значения растут монотонно с ростом энергии E , стремятся к нулю при $E \rightarrow -\infty$ и аналитичны всюду за исключением, может быть, точек спектра Дирихле, где они могут иметь простые полюса.

Находя элементы матриц N и D , получаем эквивалентную задачу для квантового графа

$$\begin{cases} f_e(v) = t_v, e \sim v; & \sum_{e \sim v} f'_e(v) = 0; \\ \begin{pmatrix} \deg 0 & 0 \\ 0 & \deg l_e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f'_e(0) \\ f'_e(l_e) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\xi - a & b \\ b & -\xi - a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_e(0) \\ f_e(l_e) \end{pmatrix}. \end{cases}$$

Заметим, что в простых случаях (например, если все ребра квантового графа имеют одну длину и все вершины имеют одну кратность) спектр квантового графа выражается через спектр дискретного графа простой формулой [1].

5. Подграфы. Оптимизация

Как раньше было показано, граф для модели нафталина задается следующим набором условий:

$$\begin{cases} \text{Условия Кирхгофа:} & 1_1 + 2_1, 2_0 + 4_0, 3_0 + 1_0, 3_1 + 5_1, 4_1 + 6_1 + 7_1, 5_0 + 6_0 + 8_0, \\ \text{Условия Кирхгофа:} & 7_0 + 9_0, 8_1 + 10_1, 9_1 + 11_1, 11_0 + 10_0; \\ \text{Свободное движение:} & 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11. \end{cases} \quad (10)$$

Здесь мы обозначили e_0 — начало, e_1 — конец ребра $e \in E$. Буквально, условие $1_1 + 2_1$ означает, что должны выполняться граничные условия:

$$A \begin{pmatrix} f'_1(l_1) \\ f'_2(l_2) \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} f(l_1) \\ f(l_2) \end{pmatrix},$$

где A и B определяются типом граничных условий; для условий Кирхгофа A и B определены формулой (1). Граничные условия могут связывать и большее число ребер. Например,

условие $5_0 + 6_0 + 8_0$ означает

$$A \begin{pmatrix} -f'_5(0) \\ -f'_6(0) \\ -f'_8(0) \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} f_5(0) \\ f_6(0) \\ f_8(0) \end{pmatrix}.$$

Ясно, что запись граничных условий можно распространить на условия общего вида, связывающие вместе начала и концы ребер:

$$a_{0/1} + b_{0/1} + \dots + z_{0/1} \Leftrightarrow A \begin{pmatrix} \pm f'_a(0/l_a) \\ \dots \\ \pm f'_z(0/l_z) \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} f_a(0/l_a) \\ \dots \\ f_z(0/l_z) \end{pmatrix},$$

где нижний индекс при ребре x принимает либо значение 0 (начало ребра), в этом случае в соответствующей позиции в векторе граничных значений стоит $f_x(0)$ и $-f'_x(0)$, или принимает значение 1, в этом случае в векторе граничных условий стоят $f_x(l_x)$ или $f'_x(l_x)$. Заметим, что в отличие от условий Кирхгофа в общей ситуации порядок вершин важен.

Условие «Свободное движение» в (10) означает, что на e задан свободный оператор Шредингера, который, как показано выше, можно заменить на энергозависящие граничные условия:

$$N \begin{pmatrix} -f'_e(0) \\ f_e(l_e) \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} f(0) \\ f(l_e) \end{pmatrix},$$

где N и D заданы выражением (3).

Как мы видим, полная система оказывается довольно большой, размера 22×22 . Для нахождения спектра графа необходимо многократно вычислять определить системы, вычисление которого имеет сложность $c_\alpha N^\alpha$, где N — число концов ребер системы, и константа $2 < \alpha \leq 3$ зависит от используемого алгоритма. Далее мы покажем, как можно уменьшить сложность вычислений, разбив граф на подграфы, и проводя вычисления для каждого подграфа в отдельности.

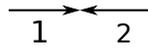


Рис. 5. Подграф из ребер 1 и 2

Чтобы продемонстрировать идею, заметим, что два последовательно соединенных ребра можно заменить на одно ребро с длиной, равной сумме длин исходных. Действительно, рассмотрим подграф из ребер $1 + 2$ (рис. 5). Для них система имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ \frac{\sin \sqrt{-\xi}x}{\sqrt{-\xi}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sin \sqrt{-\xi}x}{\sqrt{-\xi}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sin \sqrt{-\xi}x}{\sqrt{-\xi}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sin \sqrt{-\xi}x}{\sqrt{-\xi}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f'_1(0) \\ f'_1(1) \\ -f'_2(0) \\ f'_2(1) \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ \cos \sqrt{-\xi}x & -1 & 0 & 0 \\ -1 & \cos \sqrt{-\xi}x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \sqrt{-\xi}x & -1 \\ 0 & 0 & -1 & \cos \sqrt{-\xi}x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1(0) \\ f_1(1) \\ f_2(0) \\ f_2(1) \end{pmatrix}.$$

Первые две строки соответствуют граничным условиям

$$A \begin{pmatrix} f_1'(1) \\ f_2'(1) \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} f_1(1) \\ f_2(1) \end{pmatrix},$$

остальные строки – условиям на ребрах. Исключим из системы переменные $f_1(1)$, $f_1'(1)$, $f_2(1)$, $f_2'(1)$. Для этого перенесем все члены уравнения налево и переставим столбцы таким образом, что устраняемые переменные шли первыми:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & \varphi & 0 & \theta & 0 \\ \varphi & 0 & \varphi' & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \varphi & 0 & \theta \\ 0 & \varphi & 0 & \varphi' & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1'(1) \\ f_2'(1) \\ f_1(1) \\ f_2(1) \\ -f_1'(0) \\ -f_2'(0) \\ f_1(0) \\ f_2(0) \end{pmatrix} = 0$$

Эту же систему можно записать в матричном виде, записав в вектор F_i исключаемые переменные, в вектор F_e оставшиеся переменные, и обозначив через A , B и C блоки матрицы системы размеров 4×4 , 2×4 и 2×4 соответственно:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_i \\ F_e \end{pmatrix} = 0. \quad (11)$$

При условии обратимости матрицы A , система оказывается эквивалентна следующей:

$$\begin{cases} F_i = -A^{-1}BF_e; \\ CF_i = 0 \end{cases} \Leftrightarrow (CA^{-1}D)F_e = 0, \text{ где } A^{-1} = \frac{1}{\varphi} \begin{pmatrix} \varphi' & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varphi' & 1 \\ -\varphi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varphi & 0 \end{pmatrix},$$

Перемножая матрицы, получаем:

$$CA^{-1}B = \begin{pmatrix} \varphi' + \varphi & \varphi' - \varphi & \theta' + \theta & \theta' - \theta \\ \varphi' - \varphi & \varphi' + \varphi & \theta' - \theta & \theta' + \theta \end{pmatrix}.$$

Следовательно, исходную систему можно заменить на эквивалентную ей меньшего размера, которая связывает только значения функции на графе во «внешних» вершинах, т.е. инцидентных ребрам, не входящим в подграф.

$$\begin{pmatrix} \varphi' + \varphi & \varphi' - \varphi \\ \varphi' - \varphi & \varphi' + \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f_1'(0) \\ -f_2'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\theta' - \theta & -\theta' + \theta \\ \theta - \theta' & -\theta - \theta' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1(0) \\ f_2(0) \end{pmatrix}$$

Следует отметить, что выше мы исключили F_e из системы (11) в предположении обратимости матрицы A . Рассмотрим случай вырожденной матрицы A . Ранг матрицы $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ не может быть больше размера F_i , т.е. суммы кратностей внутренних вершин. Пусть ранг максимален, тогда преобразованием Гаусса можно привести систему к виду

$$\begin{pmatrix} A & B \\ 0 & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_i \\ F_e \end{pmatrix} = 0, \quad \det A \neq 0.$$

Из этой системы однозначно находится $F_i = -A^{-1}BF_e$, и система оказывается равносильной системе $DF_e = 0$. Предположим, что $\text{rang} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix}$ не максимален. Это означает, что

найдется вектор вида $\begin{pmatrix} F_i \\ 0 \end{pmatrix}$, удовлетворяющий системе. В свою очередь это означает, что существует собственная функция, локализованное на подграфе. Исследуем вопрос возможности исключения из системы переменных F_i в случае наличия локализованных на графе собственных функций. Приведем матрицу $\begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix}$ к диагональному виду Ядро $\text{Ker} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ состоит из векторов $(0, 0, \dots, 0, x, x, \dots, x, 0, 0, \dots, 0)$ таких, что $n+k$ строки нулевые. Эти векторы могут быть собственными и при $B_{n+k} \neq 0$, но только при подходящем значении F_e . Т.о. исключить можно только n переменных.

Подытоживая, аналогично тому, как мы заменили дифференциальный оператор на ребре на условия Дирихле–Неймана, связывающие значения собственных функций на концах ребер, можно заменить подграф на условия, связывающие значения собственных функций только на внешних концах ребер графа.

Как было показано выше, исключение N внутренних вершин из графа с M внешними вершинами имеет сложность, равную сложности обращения матрицы A и перемножения матриц $CA^{-1}B$, что имеет итоговую сложность $c_\beta N^\beta + c_\gamma N^\gamma M$, где $2 < \beta \leq 3$, $1 < \gamma \leq 2$ в зависимости от алгоритма. Покажем, каким образом применение алгоритма «разделяй и властвуй» позволяет уменьшить сложность вычислений. Рассмотрим для простоты граф из 2^{n-1} ребер (т.е. 2^n концов ребер), причем будем полагать, что для всех шаров в графе справедлива оценка

$$\#\partial B \leq c_\delta (\#B)^\delta, \quad 0 \leq \delta \leq 1, \quad (12)$$

где $\#B$ — число концов ребер, лежащих в шаре, а $\#\partial B$ — число концов ребер, входящих в вершины границы шара. В силу указанной оценки, число внешних концов ребер не превосходит $c_\delta 2^{n\delta}$, а число внутренних концов очевидно меньше 2^n , следовательно сложность исключения внутренних концов ребер можно оценить как

$$c_\beta 2^{n\beta} + c_\gamma 2^{n\gamma} c_\delta 2^{n\delta} \leq c_\epsilon 2^{n\epsilon},$$

для $\epsilon = \max(\beta, \gamma + \delta)$, $2 < \epsilon \leq 3$. Разобьем теперь граф на два подграфа с числом концов ребер равным 2^{n-1} . В силу оценки (12) общая граница подграфов не может быть больше $c_\delta 2^{(n-1)\delta}$. Аналогично приведенным выше рассуждениям, сложность исключения внутренних концов ребер из одного подграфа оценивается сверху величиной $c_\epsilon 2^{(n-1)\epsilon}$. После исключения внутренних концов ребер для подграфов, в исходном графе остается $c_\delta 2^{(n-1)\delta}$ внутренних концов ребер, являющихся общей границей для подграфов. Их исключение имеет сложность

$$c_\beta (c_\delta 2^{(n-1)\delta})^\beta + c_\gamma (c_\delta 2^{(n-1)\delta})^\gamma c_\delta 2^{(n-1)\delta} \leq c_\beta c_\delta^\beta 2^{(n-1)\delta\beta} + c_\gamma c_\delta^{\gamma+1} 2^{(n-1)\delta(\gamma+1)} \leq c_\theta 2^{(n-1)\theta},$$

для $\theta = \delta \max(\beta, \gamma + 1)$, $0 < \theta \leq 3$. Таким образом итоговая сложность исключения концов ребер через разбиение на два подграфа равна

$$2c_\epsilon 2^{(n-1)\epsilon} + c_\theta 2^{(n-1)\theta}.$$

Заметим, что исключение внутренних концов ребер для подграфов тоже можно было проводить разбив каждый из них на два подграфа и т.д. Выполним такое разбиение k раз, мы получаем алгорит сложности не превосходящей

$$2^k c_\epsilon 2^{(n-k)\epsilon} + \sum_{j=1}^k 2^{j-1} c_\theta 2^{(n-j)\theta} = c_\epsilon 2^{(n-k)\epsilon+k} + c_\theta 2^{n\theta-1} \sum_{j=1}^k 2^{j(1-\theta)}. \quad (13)$$

Выполнив предельно возможное количество разбиений $k = n$, получаем алгоритм сложности

$$c_\epsilon 2^n + c_\theta 2^{n\theta-1} \sum_{j=1}^n 2^{j(1-\theta)} \leq c_\epsilon 2^n + c_\theta 2^{n\theta-1} \begin{cases} 2^{1-\theta}, & \theta > 1, \\ n 2^{n(1-\theta)}, & 0 \leq \theta \leq 1, \end{cases}$$

Вспоминая, что число ребер графа равно $N = 2^{n-1}$, замечаем, что алгоритм «разделяй и властвуй» имеет сложность

$$O(N) + \begin{cases} O(N^\theta), & \theta > 1, \\ O(N \log N), & 0 \leq \theta \leq 1. \end{cases}$$

Как мы видим, сложность полученного алгоритма зависит от структуры графа. Рассмотрим предельные случаи. Если граф полный, то $\delta = 1$ и $\theta = \max(\beta, \gamma + 1)$, т.е. сложность алгоритма равна сложности более медленного из применяемых алгоритмов обращения матрицы и матричного произведения. и мы не получаем никакого ускорения за счет разбиения на подграфы. Если же граф является двоичным деревом, то выбирая в качестве подграфов ветви, выходящие из одной вершины, мы получаем на каждом шаге постоянное число внешних концов ребер, т.е. $\delta = 0$. Тогда сложность алгоритма равна $O(N \log N)$, и мы получаем значительное ускорение.

Обратимся еще раз к рассмотренному нами примеру молекулы нафталина. Можно заметить, что модельный граф содержит два идентичных подграфа из ребер $5+3+1+2+4$ и из ребер $7+9+11+10+8$. Ясно, что выполняя алгоритм «разделяй и властвуй», достаточно выполнить вычисления только для одного подграфа, так как для второго мы получим тот же результат. Данное наблюдение предоставляет дальнейшие возможности для ускорения вычислений для графов, имеющих несколько одинаковых подграфов. Предельным случаем таких графов являются самоподобные графы, которые могут быть разделены на идентичные части. Оценим скорость работы алгоритма «разделяй и властвуй» для самоподобного графа. Формула (13) принимает вид

$$c_\epsilon 2^{(n-k)\epsilon} + \sum_{j=1}^k c_\theta 2^{(n-j)\theta} = c_\epsilon 2^{(n-k)\epsilon} + c_\theta 2^{n\theta} \sum_{j=1}^k 2^{-j\theta}.$$

так как на каждом шаге разбиение мы имеем 2^k копий одного единственного графа, для которого вычисления производятся один раз. Выполняя максимально возможное число разбиений $k = n$, получаем алгоритм сложности

$$c_\epsilon + c_\theta 2^{n\theta} \sum_{j=1}^n 2^{-j\theta} \leq c_\epsilon + c_\theta 2^{n\theta} \begin{cases} \frac{2^{-\theta}}{1 - 2^{-\theta}}, & \theta > 0, \\ n, & \theta = 0. \end{cases}$$

Возвращаясь к числу ребер $N = 2^n$, получаем сложность алгоритма равную

$$\begin{cases} O(N^\theta), & \theta > 0, \\ O(\log N), & \theta = 0. \end{cases} \quad (14)$$

Заметим, что в описываемом алгоритме «разделяй и властвуй» вычисления для каждого подграфа производятся независимо, что позволяет проводить их параллельно. Если бы число проводимых параллельно вычислений могло быть неограниченно, то время работы алгоритма для произвольного графа было бы равно (14).

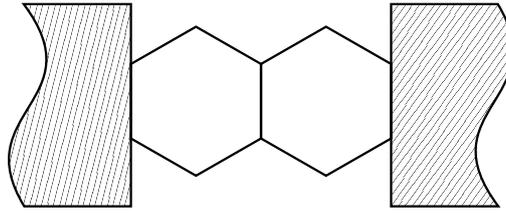


Рис. 6. Молекула нафталина с присоединенными резервуарами

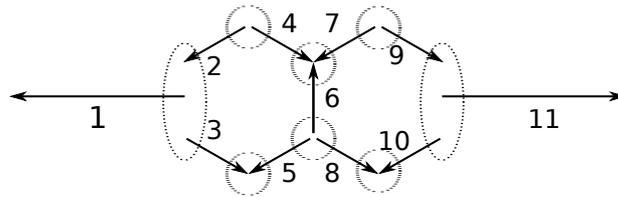


Рис. 7. Квантовый граф, моделирующий рассеяние на молекуле нафталина. Лучи 1 и 11 моделируют резервуары. Пунктирной линией обведены концы ребер, которые связываются общими граничными условиями.

6. Задача рассеяния

Пусть теперь граф содержит бесконечную компоненту. На этой компоненте существует решение в виде падающих волн. Задача рассеяния состоит в установлении связи между коэффициентами при состояниях рассеяния.

В качестве примера рассмотрим рассеяние на молекуле нафталина (рис. 6). В модели квантовых графов резервуары моделируются с помощью одномерных волноводов (рис. 7). На лучах 1, 11 заданы обычные оператора Шредингера с асимптотически свободным потенциалом

$$H_k f_k(x) = -f_k''(x) + v_k(x) f_k(x), \quad k = 1, 11.$$

Способ присоединения резервуаров задается граничными условиями, в рассматриваемом примере это условия в точках $1 + 2 + 3$ и $9 + 10 + 11$. Если нет каких-либо особенных физических причин, условия соединения с резервуаром выбираются условиями Кирхгофа.

Мы работаем в рамках стационарной теории рассеяния, поэтому ищем решения уравнения Шредингера на функциях, локально лежащих в классе Соболева $W_{loc}^{2,2}$ на графе. Все, что было сказано выше про точки склейки и конечные ребра, остается верным. Это означает, что можно заменить подграф из ребер 2–10 на «черный ящик», имеющий тоже отображение Дирихле–Неймана, что и подграф. Заметим что ребра 1, 11 в подграф не входят, однако граничные условия в точках $1 + 2 + 3$ и $9 + 10 + 11$ входят.

Обозначим через D_b и N_b матрицы, задающие отображение Дирихле–Неймана. Тогда систему на определение состояний рассеяния можно записать в виде:

$$\begin{cases} -f_k''(x) + V_k(x) f_k(x) = E f_k(x), & k = 1, 11, \\ D_b(E) \begin{pmatrix} f_1(0) \\ f_{11}(0) \end{pmatrix} = N_b(E) \begin{pmatrix} -f_1'(0) \\ -f_{11}'(0) \end{pmatrix}. \end{cases}$$

Решения на лучах 1, 11 являются асимптотически свободными, т.е.

$$f_k(x) \approx c_k^+ e^{\sqrt{-E}x} + c_k^- e^{-\sqrt{-E}x} \text{ при } x \rightarrow \infty.$$

С другой стороны, решение можно разложить в линейную комбинацию фундаментальных:

$$f_k(x) = f_k(0)\theta_k(x) + f'_k(0)\phi_k(x),$$

$$\theta_k(0) = \phi'_k(0) = 1, \quad \theta'_k(0) = \phi_k(0) = 0.$$

Между условиями Коши и коэффициентами при свободных волнах существует линейное соответствие

$$T_k(E) \begin{pmatrix} c_k^+ \\ c_k^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_k(0) \\ -f'_k(0) \end{pmatrix}.$$

Найдем матрицу перехода T_k для случая $V_k = 0$. В этом случае

$$f_k = c_k^+ e^{\sqrt{-E}x} + c_k^- e^{-\sqrt{-E}x},$$

следовательно

$$f_k(0) = c_k^+ + c_k^-, \quad -f'_k(0) = \sqrt{-E}(c_k^- - c_k^+).$$

Т.о. систему на состояния рассеяния можно переписать в виде

$$\begin{cases} T_k \begin{pmatrix} c_k^+ \\ c_k^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_k(0) \\ -f'_k(0) \end{pmatrix}, & T_k = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\sqrt{-E} & \sqrt{-E} \end{pmatrix}, & k = 1, 11, \\ D_b(E) \begin{pmatrix} f_1(0) \\ f_{11}(0) \end{pmatrix} = N_b(E) \begin{pmatrix} -f'_1(0) \\ -f'_{11}(0) \end{pmatrix}. \end{cases}$$

Покажем, как найти матрицу рассеяния S , т.е. отображение, переводящее коэффициенты при падающих волнах в коэффициенты при отраженных:

$$S(E) \begin{pmatrix} c_1^+ \\ c_{11}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1^- \\ c_{11}^- \end{pmatrix}.$$

Чтобы найти матрицу рассеяния, нужно исключить из системы величины $f_1(0)$, $f_{11}(0)$, $f'_1(0)$, $f'_{11}(0)$. Прделаем это для $V_{1,11} = 0$. Получим

$$S(E) = (D_b - \sqrt{-E}N_b)^{-1} (D_b + \sqrt{-E}N_b).$$

Если N_b обратима, то

$$S(E) = 1 + 2\sqrt{-E} (D_b - \sqrt{-E}N_b)^{-1} N_b = 1 + 2\sqrt{-E} (N_b^{-1}D_b - \sqrt{-E})^{-1}, \quad (15)$$

где $N_b^{-1}D_b$ — функции Вейля. Эта формула естественным образом продолжается на случай многообразий.

Если решения на лучах были лишь асимптотически свободными, то матрицы T_k имеют более сложный вид. Если эти матрицы известны, то матрица рассеяния находится по формуле

$$S(E) = (T^{12}D_b - T^{22}N_b)^{-1} (T^{11}D_b + T^{21}N_b), \quad T^{jl} = \text{diag}_k(T_k^{jl}), \quad T_k = \begin{pmatrix} T_k^{11} & T_k^{12} \\ T_k^{21} & T_k^{22} \end{pmatrix}$$

7. Электромагнитное поле

Чтобы включить в рассмотрение электромагнитное поле, необходимо задать вложение графа в пространство. Рассмотрим отдельное ребро, заданное параметрически $r(t) = (r_1(t), r_2(t), r_3(t))$, $r : [0, l_e] \rightarrow \mathbb{R}^3$ в натуральной параметризации $|\dot{r}| \equiv 1$. Электромагнитное поле зададим векторным $\vec{A} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ и скалярным $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ потенциалами. Оператор Шредингера в \mathbb{R}^3 принимает вид

$$Hf(r) = -\left(\nabla - i\vec{A}\right)^2 f + Vf$$

в безразмерных единицах, таких, что $e = \hbar = 1$, $m = 1/2$. Так как в изучаемом случае движение ограничено кривой, то оператор магнитного импульса ограничивается на касательное подпространство к кривой

$$\dot{r} \cdot \left(\nabla - i\vec{A}\right) f = \dot{r} \cdot (\nabla f) - i \left(\dot{r} \cdot \vec{A}\right) f = \frac{\partial}{\partial t} f(r(t)) - ia(t)f(r(t)),$$

где $a(t) = \dot{r}(t) \cdot \vec{A}(r(t))$. Т.е. на кривой оператор Шредингера принимает вид

$$Hf(t) = -\left(\frac{\partial}{\partial t} - ia\right) f(t) + V(t)f(t),$$

где

$$V(t) = V(r(t)). \tag{16}$$

Заметим, что магнитное поле можно устранить заменой

$$f(t) = g(t) \exp \left[i \int_0^t a(\tau) d\tau \right].$$

Тогда спектральная задача $Hf = Ef$ равносильна уравнению

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + V \right) g = Eg.$$

Т.о. g удовлетворяет уравнению Шредингера без магнитного поля и с тем же скалярным полем. Найдем, как изменятся граничные условия при этой замене. Ранее мы записывали граничные условия в терминах f и f' , однако физический смысл имеет магнитная производная $\partial = \frac{\partial}{\partial t} - ia$, которая без магнитного поля совпадает с обычной производной. Заменяя производную магнитной производной в условиях Кирхгофа, получаем так называемые магнитные условия Кирхгофа:

$$\begin{cases} f_e(v) = f_{e'}(v) \quad \forall e, e' \text{— инцидентных } v; \\ \sum_{e \sim v} \partial f(e(v)) = 0. \end{cases}$$

Так как

$$\partial f_e(t) = \partial \left(e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} g(t) \right) - aig(t) e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} = g'(t) e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau},$$

то справедливо

$$\begin{cases} \partial f_e(0) = g'_e(0); \\ \partial f_e(l) = g'_e(l) e^{i\Phi}; \\ f_e(0) g_e(0); \\ f_e(l) = g_e(l) e^{i\Phi}. \end{cases}$$

Т.о. магнитные условия Кирхгофа принимают для g следующий вид

$$\begin{cases} e^{i\Phi_e(v)} g_e(v) = g_{e'}(v) e^{i\Phi_{e'}(v)}; \\ \sum_e g'_e(v) e^{i\Phi_e(v)} = 0, \end{cases}$$

где

$$\Phi_e(v) = \begin{cases} 0, & \text{если } v \text{ — начало ребра } e; \\ \int_0^t a_e(\tau) d\tau, & \text{если } v \text{ — конец ребра } e. \end{cases}$$

Подытоживая, для добавления в систему магнитного поля нужно вычислить набег фазы $\int_0^l a(\tau) d\tau = \Phi_e(l)$ для каждого ребра e . Затем граничные условия

$$A_v \begin{pmatrix} f_{e_1}(v) \\ f_{e_2}(v) \end{pmatrix} = B_v \begin{pmatrix} f'_{e_1}(v) \\ f'_{e_2}(v) \end{pmatrix}$$

заменить на

$$A_v \begin{pmatrix} e^{i\Phi_{e_1}(v)} g_{e_1}(v) \\ e^{i\Phi_{e_2}(v)} g_{e_2}(v) \end{pmatrix} = B_v \begin{pmatrix} e^{i\Phi_{e_1}(v)} g'_{e_1}(v) \\ e^{i\Phi_{e_2}(v)} g'_{e_2}(v) \end{pmatrix}.$$

Заметим, что условия содержащие отображение Дирихле–Неймана g_e не содержат набега фазы, т.е. уравнения $-g''_e + Vg_e = E g_e$ заменяется на системы

$$D_e \begin{pmatrix} g_e(0) \\ g_e(l) \end{pmatrix} = N_e \begin{pmatrix} -g'_e(0) \\ g'_e(l) \end{pmatrix}.$$

Окончательно, уравнение Шредингера на ребре с магнитным полем можно заменить на систему

$$\begin{cases} A_v e^{i\Phi_e(v)} g(v) = B_v e^{i\Phi_e(v)} g'(v); \\ D_e g_e = N_e g'_e \end{cases}$$

или на эквивалентную систему в других переменных

$$\begin{cases} A_v f(v) = B_v \partial f(v); \\ D_e e^{-i\Phi_e(v)} f_e = N_e e^{-i\Phi_e(v)} \partial f_e, \end{cases}$$

где A_v и B_v имеют тот же вид, что и для граничных условий без магнитного поля.

8. Вольт-амперная характеристика

Рассмотрим систему, состоящую из двух резервуаров, между которыми есть разность потенциалов U , и заключенного между ними образца. В рассматриваемом приближении образец заменяется на некий модельный квантовый граф, а резервуары заменяются на лучи, которые присоединены граничными условиями к точкам образца, касающимся резервуаров (см. раздел 6).

Приложенный потенциал U вызывает возникновение внешнего электрического поля, в результате чего потенциал на ребрах раскладывается в сумму двух потенциалов: $V_{e,in}$ – определяемого химической связью вдоль ребра e , и $V_{e,out}$ – определяемого приложенным напряжением и формой резервуаров. Потенциал $V_{e,out}$ выбирается постоянным на ребрах, моделирующих резервуары, причем разность потенциалов на этих ребрах равна U . Для ребер, моделирующих образец, $V_{e,out}$ вводится по формуле (16), где в качестве потенциала в пространстве, берется потенциал, порожденный разностью потенциалов на резервуарах.

В простейшем случае резервуаров с плоскими параллельными границами, потенциал между резервуарами изменяется в пространстве линейно, что ведет к линейному изменению потенциалов на ребрах.

Как отмечалось ранее, обычно потенциал $V_{e,in}$ выбирается постоянным на каждом ребре. Для ребер, моделирующих химические связи, потенциал можно положить равным $V_{e,in} = 0$. Однако для ребер, моделирующих резервуары, необходимо учесть, что энергия электрона отсчитывается от уровня Ферми, т.е. для резервуаров необходимо положить

$$V_{e,in} = -E_e,$$

где E_e – энергия Ферми для материала, из которого сделан резервуар e .

В качестве примера рассмотрим систему из раздела 6. Выберем за начало отсчета уровень энергии электронов с энергией Ферми на ребре 1, тогда потенциалы принимают вид

$$V_{1,in} = -E_1, \quad V_{1,out} = 0, \quad V_{11,in} = -E_{11}, \quad V_{11,out} = U.$$

Согласно формуле (15) матрица рассеяния принимает вид

$$S(E) = (D_b - \text{diag}(\sqrt{E_1 - E}, \sqrt{U + E_{11} - E})N_b)^{-1}(D_b + \text{diag}(\sqrt{E_1 - E}, \sqrt{U + E_{11} - E})N_b).$$

Ясно, что состояния рассеяния существуют только при $E > \max(E_1, E_{11} + U)$, и только для этих энергий существует матрица рассеяния. Записав матрицу рассеяния в виде

$$S(E) = \begin{pmatrix} \rho_1 & \tau_{11 \rightarrow 1} \\ \tau_{1 \rightarrow 11} & \rho_{11} \end{pmatrix},$$

можно придать следующий смысл коэффициентам: $|\rho_e|^2$ – вероятность отражения падающей с ребра e волны, $|\tau_{e \rightarrow e'}|^2$ – вероятность прохождения электрона из ребра e в ребро e' .

Найдем ток, который течет через систему из-за приложенной разницы потенциалов. Ток вероятности для плоской волны $\phi(x) = c \cdot e^{\pm ikx}$ в отсутствие магнитного поля равен

$$j(x) = \text{Re} \overline{\phi(x)} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi(x) = |c|^2 \text{Re} e^{\mp ikx} (-i)(\pm ik) e^{\pm ikx} = \mp k |c|^2.$$

Записав состояние рассеяния на луче e в виде

$$\phi_e(x) = c_e^+ e^{i\sqrt{E - V_{e,ext}}x} + c_e^- e^{-i\sqrt{E - V_{e,ext}}x},$$

мы видим, что по лучу течет ток силой $j_e^+ = |c_e^+|^2 \sqrt{E - V_{e,ext}}$ в направлении к началу луча, и силой $j_e^- = |c_e^-|^2 \sqrt{E - V_{e,ext}}$ в направлении от начала луча. Воспользовавшись найденной ранее матрицей рассеяния, получаем следующую связь между токами на разных лучах:

$$j_e^+ |\tau_{e \rightarrow e'}|^2 = j_{e'}^-.$$

9. Периодические системы

В качестве примера рассмотрим молекулу полиацена, который моделируется бесконечным квантовым графом, изображенным на рис. 8.

Найдем зонную структуру спектра. Для этого будем решать уравнение Шредингера на функциях, локально принадлежащих пространствам Соболева $W^{2,2}$. Решение ищем в виде блоховской волны, так как любое решение может быть разложено в интеграл по блоховским волнам.

Блоховская волна имеет вид

$$f_e(x) = f_{e'}(x) e^{ipn}$$

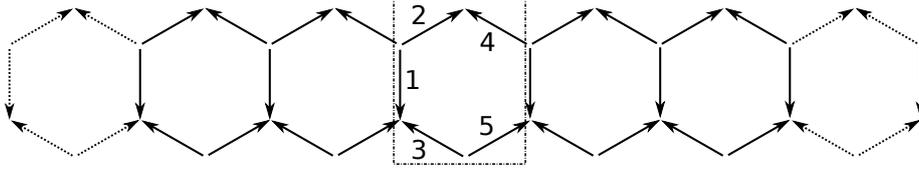


Рис. 8. Граф, моделирующий молекулу полиацена

для любых ребер e и e' , таких что e' получается сдвигом e на n фундаментальных ячеек. Параметр p блоховской волны называется квазиимпульсом.

Так как функции на ребрах вне фундаментальной ячейки выражаются через фундаментальную ячейку, мы можем выбросить ребра вне фундаментальной ячейки. Тогда граф принимает вид, изображенный на рис. 9.

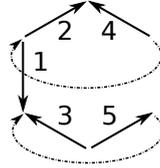


Рис. 9. Фундаментальный подграф для модели молекулы полиацена. Стрелками соединены вершины, переходящие друг в друга при сдвиге вправо на одну ячейку

Операторы на ребрах и соответствующие отображения Дирихле–Неймана имеют тот же вид, что и для неперiodической системы. Граничные условия во внутренних точках фундаментальной ячейки имеют обычный вид (мы опять считаем $l_e = 1 \forall e$)

$$\text{Условия Кирхгофа: } 2_1 + 4_1, 3_0 + 5_0.$$

Однако в граничных вершинах условия изменяются:

$$\begin{cases} f_2(0) = f_1(0) = f_4(0); \\ -f'_2(0) - f'_1(0) - f'_4(0) = 0; \\ f_1(1) = f_3(1) = g_5(1)e^{i\phi}; \\ f'_1(1) + f'_3(1) + f'_5(1)e^{i\phi} = 0. \end{cases}$$

Ясно, что граничные условия изменяются простой заменой функции

$$\begin{aligned} f_e(0) &\rightarrow f_e(0), \\ f_e(1) &\rightarrow f_e(1)e^{ipn} \end{aligned}$$

для ребра из n -ой ячейки.

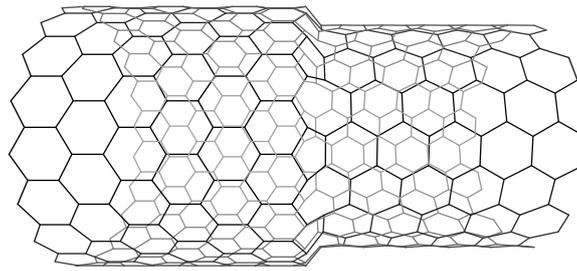
Т.о. для периодической системы граничные условия удобно писать в виде

$$\text{Условия Кирхгофа: } 2_0 + 1_0 + 4_0(1), 1_1 + 3_1 + 5_1(1).$$

Если группа периодичности имеет конечный порядок \mathbb{Z}_n (например см. рис. 10), то анализ в этом случае аналогичен случаю \mathbb{Z} , но для \mathbb{Z}_n квазиимпульс принимает значения

$$p \in \left\{ \frac{2\pi k}{n}; \quad k = 0, \dots, n-1 \right\}.$$

Для \mathbb{Z} имеем $p \in [0, 2\pi]$.

Рис. 10. Пример графа с группой периодичности \mathbb{Z}_n .

Аналогично можно рассматривать группы периодичности с несколькими образующими, вводя несколько квазиимпульсов.

10. Обратные задачи. Генетические алгоритмы решения

Одной из важнейших задач нанотехнологии является создание систем с заданными свойствами. Данная задача является обратной к обсуждаемым выше задачам вычисления спектра системы, свойств рассеяния и т.п. К сожалению, зависимость свойств системы от ее конфигурации слишком сложна, чтобы в настоящее время предложить чисто математическое решение обратных задач. Частичным решением данной проблемы является использование генетических алгоритмов, которые позволяют находить решение оптимизационных задач без детальной информации об оптимизируемом функционале и для сложных для формализации в терминах функционального анализа пространств решений.

Напомним, в чем заключается генетический алгоритм. Алгоритм находит последовательные приближения для задачи оптимизации некоторого функционала, называемой функцией приспособленности. Множество приближенных решений, найденных алгоритмом в некоторый момент времени, называется популяцией, а сами приближенные решения называются особями. Генетический алгоритм допускает множество вариаций, мы опишем наиболее типичные шаги, выполняемые алгоритмом.

- (1) Этап скрещивания. Из существующей популяции выбираются группы из нескольких особей, и для каждой группы создается новая особь таким образом, что новая особь наследует некоторые черты ее предков.
- (2) Этап мутации. Новые особи изменяются некоторым образом так, чтобы значение целевой функции изменялось незначительно.
- (3) Этап отбора. Для новых особей вычисляется функция приспособленности. Из всей популяции, включающей и новые особи, отбирается некоторое подмножество, которое заменит предыдущую популяцию. Отбор осуществляется таким образом, чтобы в новую популяцию входили особи с лучшим значением функции приспособленности, но при этом разнообразие популяции уменьшалось не слишком сильно.
- (4) Если значение функции приспособленности удовлетворяет условиям остановки (достигнуто требуемое приближение), или время отпущенное на работу алгоритма исчерпано, работа алгоритма прекращается. В противном случае возвращаемся к первому шагу.

При решении генетическим алгоритмом обратной задачи, в качестве особей будут выступать конфигурации квантовомеханической системы (например, структуры молекулы), а в качестве функции приспособленности выбирается величина обратная численному выражению отличия свойств системы от целевых. Как мы видим, выполнение генетического алгоритма требует многократного вычисления целевой функции, т.е. многократного

решения прямой задачи. Сложность решения прямой задачи в первопринципных методах делает применение генетического алгоритма с использованием таких методов почти невозможным. Однако в модели квантовых графов решение прямых задач выполняется весьма быстро, что делает модель квантовых графов идеальной для использования вместе с генетическими алгоритмами. Также следует отметить, что генетические алгоритмы допускают эффективное распараллеливание [14], что делает их подходящими для выполнения на суперкомпьютерах. Как было показано в предыдущем разделе, расчеты на квантовых графах также имеют высокую степень распараллеливания, что делает разумным выбор модели квантовых графов для использования и в параллельной архитектуре.

Выделим две основные обратные задачи, которые наиболее востребованы в приложениях. Первая задача заключается в конструировании графа с заданной шириной запрещенной зоны. Ширина запрещенной зоны находится как разность между энергией следующего за последним заполненным уровнем и энергией заполненного уровня. Уровни заполняются последовательно в порядке увеличения энергии. Число заполненных уровней равно половине числа моделируемых электронов в системе. В качестве функции приспособленности можно выбрать любую функцию вида $F(|E_{N+1} - E_N - \Delta|)$, где F монотонно убывает. Тогда в качестве мутаций можно использовать обычное удаление или добавление одной вершины графа, которые приводят к небольшому изменению спектра.

Важно отметить, что обычный для генетических алгоритмов механизм скрещивания, заключающийся в обмене информацией между описывающими особей строками, плохо подходит к рассматриваемой задаче. Это связано с трудностью представления структуры графа с помощью строки таким образом, чтобы подстроки описывали достаточно широкий класс подграфов. Таким образом скрещивание графов с помощью строк приводит к значительному изменению структуры графа, что значительно изменяет спектр. Гораздо практичнее скрещивать графы таким образом, чтобы получающийся граф имел почти такой же спектр, как и предки. К сожалению, известно мало операций над графами, для которых известен спектр результата. Мы предлагаем использовать в качестве операции скрещивания дизъюнктивное объединение графов. Известно, что спектр дизъюнктивного объединения графов равен объединению спектров исходных графов. Следовательно, если спектр исходный графов уже был посчитан, ширина запрещенной зоны их объединения может быть вычислена очень быстро. Таким образом, вместо слепого выбора пар для скрещивания, можно выбирать пары, которые будут давать потомство с лучшей приспособленностью, что увеличит скорость сходимости алгоритма. Однако с точки зрения химии дизъюнктивное объединение представляет собой смесь нескольких веществ, поэтому на практике при скрещивании следует выбирать объединение с малым пересечением.

Описанный способ скрещивания приводит к быстрому увеличению размера системы, и следовательно, к быстрому замедлению вычислений. Поэтому необходимо модифицировать генетический алгоритм, добавив еще один этап, на котором некоторые графы из популяции разрезаются на составные части, которые добавляются в популяцию.

Следует отметить, что обратная спектральная задача для квантового графа не имеет единственного решения, так как существуют изоспектральные графы [20]. Наличие множества графов, удовлетворяющих заданным требованиям, позволяет надеяться на более быстрое нахождение хотя бы какого-то графа, дающего решение обратной спектральной задачи генетическим алгоритмом. Однако, наличие изоспектральных графов ставит новую теоретическую проблему выбора среди семейства всех решений обратной задачи той системы, которую легче синтезировать на практике.

Второй важной обратной задачей является создание графа с заданной вольт-амперной характеристикой. В качестве функции приспособленности можно выбрать функцию

$$w = F \left(\max_{U \in [U_{min}, U_{max}]} |j_{mod}(U) - j_{target}(U)| \right),$$

где максимум берется по всем значениям напряжения, при которых будет эксплуатироваться система, j_{mod} – вольт-амперная характеристика модельной системы, j_{target} – желаемая вольт-амперная характеристика, а F – произвольная монотонно убывающая функция. В качестве преобразований мутации и скрещивания можно выбрать те же операции, что и для задачи оптимизации ширины запрещенной зоны.

Работа по разделам 1, 5, 8, 10 выполнена в рамках государственного контракта №07.514.11.4146 в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы» научно-исследовательские работы по лоту шифр «2012-1.4-07-514-0017» «Суперкомпьютерное моделирование процессов создания материалов с заданными оптоэлектронными свойствами для инновационных технологий» по теме: «Высокопроизводительный программный комплекс для моделирования электронных и электромеханических свойств нанокремниевых объектов» (шифр заявки «2012-1.4-07-514-0017-023»).

Работа по разделам 2, 3, 4, 6, 7, 9 выполнена в рамках соглашения №14.В37.21.0371 о выполнении научно-исследовательской работы по теме «Спектральный анализ на гибридных многообразиях» (номер заявки в информационной компьютеризированной системе «2012-1.2.2-12-000-1001-047») в рамках реализации федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (приложение № 2.2 к федеральной целевой программе «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы, утвержденной постановлением Правительства Российской Федерации от 28 июля 2008 года № 568).

Литература

- [1] Alexander S. Superconductivity of networks. A percolation approach to the effects of disorder // *Phys. Rev. B.* — 1983. — 27. — P. 1541–1557.
- [2] Platt J. R., Ruedenberg K., et. al. *Free-Electron Theory of Conjugated Molecules* — Wiley, 1964.
- [3] Kuchment P. Graph models of wave propagation in thin structures // *Waves in Random Media.* — 2002. — V. 12, No. 4. — P. R1–R24.
- [4] Exner P., Post O. Approximation of quantum graph vertex couplings by scaled Schroedinger operators on thin branched manifolds // *Commun. Math. Phys.*, to appear.
- [5] Ceresole A., Rasetti M. and Zecchina R. Geometry, topology, and physics of non-Abelian lattices // *La Rivista del Nuovo Cimento.* — 1998. — V. 21, No. 5. — P. 1–56.
- [6] Павлов Б. С. Модель потенциала нулевого радиуса с внутренней структурой // *ТМФ* — 1984. — Т. 59, № 3. — С. 345–353.
- [7] Staszewska G., Staszewski P., et. al. Many-body tight-binding model for aluminum nanoparticles // *Phys. Rev. B.* — 2005. — V. 71. — P. 045423.
- [8] Брюнинг Й., Гейлер В. А., Лобанов И. С. Спектральные свойства операторов Шрёдингера на декорированных графах // *Матем. заметки.* — 2005. — Т. 77, № 6. — С. 932–935
- [9] Лобанов И.С., Попов И.Ю. Рассеяние на стыке нанотрубок «зигзаг» и «кресло» // *Наносистемы: физика, химия, математика.* — 2012. — Т. 3, № 2. — С. 4–26.
- [10] Golubok A.O., Popov I.U., Mukhin I.S., Lobanov I.S. Creation and study of 2D and 3D carbon nanographs // *Physica A.* — 2012. — V. 44. — P. 976–980.
- [11] Korotyaev E., Lobanov I. Schrödinger operators on zigzag graphs // *Annales Henri Poincare.* — 2007. — V. 8, No. 6. — P. 1151–1176.
- [12] Gharekhanlou B., Khorasani S. Current-Voltage Characteristics of Graphane p-n Junctions // *IEEE Transactions on Electron Devices.* — 2010. — V. 57, issue 1. — P. 209–214.

- [13] Savini G., Ferrari A. C., Giustino F. Doped graphane: a prototype high-Tc electron-phonon superconductor // *Phys Rev Lett.* — 2010. — V. 105. — P. 037002.
- [14] Cantu-Paz E. A Survey of Parallel Genetic Algorithms // *Calculateurs paralleles.* — 1998. — V. 10. — P. 141–171.
- [15] Graphene — Synthesis, Characterization, Properties and Applications. Ed. by Jian Ru Gong. — InTech, 2011.
- [16] Graphene: Properties, Synthesis and Applications. Ed. by Zhiping Xu — Nova Science Pub Inc, 2012.
- [17] Coulter S. A Maple Application for Testing Self-Adjointness on Quantum Graphs // *SIAM Undergraduate Research Online (SIURO).* — 2012, — V. 5.
- [18] Лобанов И.С. Программа расчета спектральных и транспортных свойств квантовых графов Qgraph // Свидетельство о регистрации № 2011617733. — 2011.
- [19] Post O. *Spectral Analysis on Graph-Like Spaces.* — Springer, 2010.
- [20] Band R., Sawicki A., Smilansky U. Scattering from isospectral quantum graphs // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical.* — 2010. — V. 43, Issue 41. — P. 415201.
- [21] Smilansky U. Discrete graphs — a paradigm model for quantum chaos // *Seminaire Poincare XIV.* — 2010. — P. 89–114.
- [22] Mufthas M.R.M., Rupasinghe C.S. 3D Modelling of Carbon Allotropes Used in Nanotechnology // *Fourth Asia International Conference on Mathematical/Analytical Modelling and Computer Simulation (AMS).* — 2010. — P. 476–481.
- [23] *Analysis on Graphs and its Applications,* Ed by. Exner P. et al. — Proc. Symp. Pure Math., AMS, 2008.
- [24] Ruffi-Tabar H. *Computational Physics of Carbon Nanotubes.* — Cambridge University Press, Cambridge, New York, 2007. — 507 p.
- [25] Korotyaev E., Lobanov I. Zigzag periodic nanotube in magnetic field // Preprint arXiv:math/0604007.
- [26] Fan Chung and Linyuan Lu. *Complex graphs and networks* // *CBMS Regional Conference Series in Mathematics.* — 2006. — No. 107.
- [27] *Quantum Graphs and Their Applications,* Ed. By Berkolaiko G. et al. // *Contemp. Math.* — 2006. — V. 415.
- [28] Albeverio S., Gesztesy F., Hoegh-Krohn R., and Holden H. *Solvable Models in Quantum Mechanics: Second Edition* // *AMS Chelsea Publishing.* — 2005. — V. 350.
- [29] Покорный Ю.В., Пенкин О.М., и др. *Дифференциальные уравнения на геометрических графах* — М.:ФИЗМАТЛИТ, 2004.
- [30] Bruning J., Geyler V. A. Scattering on compact manifolds with infinitely thin horns // *J. Math. Phys.* — 2003. — V. 44. — P. 371–405.
- [31] Liu Y. J., Chen X. L. Continuum Models of Carbon Nanotube-Based Composites Using the Boundary Element Method // *Electronic Journal of Boundary Elements.* — 2003. — V. 1, No. 2. — P. 316–335.
- [32] Dequesnes M., Rotkin S. V., Aluru N. R. Calculation of pull-in voltages for carbon-nanotube-based nanoelectromechanical switches // *Nanotechnology.* — 2002. — V. 13. — P. 120–131.
- [33] Van Lier G., Van Alsenoy C., Van Doren V., Geerlings P. Ab initio study of the elastic properties of single-walled carbon nanotubes and graphene // *Chemical Physics Letters.* — 2000. — V. 326, Issues 1–2. — P. 181–185.
- [34] Marx D., Hutter J. Ab-initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation // *Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, Proceedings.* — 2000. — V. 3. — P. 329–477.
- [35] Ceresole A., Rasetti M., Zecchina R. Geometry, topology, and physics of non-Abelian lattices // *La Rivista del Nuovo Cimento.* — 1998. — V. 21, No. 5. — P. 1–56.
- [36] Fan Chung. *Spectral Graph Theory* // *CBMS Regional Conference Series in Mathematics.* — 1997. — No. 92.
- [37] Avron J. E., Raveh A., Zur B. Adiabatic quantum transport in multiply connected systems // *Rev. Modern Phys.* — 1988. — V. 60, No. 4. — P. 873–915.
- [38] Ruedenberg K., Scherr C.W. Free-electron network model for conjugated systems. I. Theory. // *J. Chem. Phys.* — 1953. — V. 21. — P. 1565–1581.
- [39] Kuhn H. Elektronengasmodell zur quantitativen Deutung der Lichtabsorption von organischen Farbstoffen // *Helv. Chim. Acta.* — 1948. — V. 31. — P. 1441.
- [40] Pauling L. The Diamagnetic Anisotropy of Aromatic Molecules // *J. Chem. Phys.* — 1936. — V. 4. — P. 673.