

## РАССЕЯНИЕ НА СТЫКЕ НАНОТРУБОК «ЗИГЗАГ» И «КРЕСЛО»

И. С. Лобанов<sup>1</sup>, И. Ю. Попов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

lobanov.igor@gmail.com, popov1955@gmail.com

Рассматривается модель квантовых графов сочленения однослойных нанотрубок типа «зигзаг» и «кресло». Дается полное описание спектра. Находятся условия возникновения связанного состояния на соединении нанотрубок. Приводится полное описание всех локализованных состояний.

**Ключевые слова:** соединение нанотрубок, однослойные углеродные нанотрубки, квантовый граф.

### 1. Введение

Общепризнанно, что углеродные нанотрубки являются одним из наиболее многообещающих материалов в нанoeлектронике. В настоящее время проводится много работ по различным соединениям нанотрубок вместе, что позволяет создавать диоды, транзисторы и более сложные электронные приборы [9]. Наиболее простым нетривиальным соединением является соединения однослойный углеродных нанотрубок типа «зигзаг»  $(2N, 0)$  и «кресло»  $(N, N)$ , которое было недавно синтезировано [2], [10]. Соединение нанотрубок приводит к нарушению кристаллической структуры на месте соединения (интерфейсе), что приводит к ухудшению проводимости (часть электронов отражается), а также к возникновению локализованных состояний [6]. За последние несколько лет появилось несколько математических моделей такого сочленения, призванных объяснить наблюдаемые эффекты [7], [8]. В настоящей статье мы предлагаем модель такого сочленения на основе квантовых графов. В отличие от дискретных моделей, квантовый граф обладает большим числом параметров, позволяющих отделить эффекты, возникающие из-за ограниченности модели, от эффектов, связанных с геометрией системы. В отличие от пертурбативных моделей модель квантовых графов является явнорешаемой, что позволяет всесторонне исследовать систему. В этой работе мы подробно излагаем математический аппарат моделей квантовых графов для однослойных трубок типа «зигзаг» и «кресло», а также для построения сочленений. Мы находим в явном виде операторы монодромии и перечисляем все локализованные состояния для указанных нанотрубок. Следует отметить, что этот результат перекликается с полученными нами ранее результатами в работах [1], [5], однако здесь мы рассматриваем другой потенциал и группу симметрий, более подходящие для исследования сочленения. Наконец мы предлагаем необходимые и достаточные условия на возникновение локализованных состояний на интерфейсе, и проверяем их на сочленении квантовых графов «зигзаг» и «кресло». Для соединения кристаллов с более простой геометрией критерий возникновения локализованных состояний был получен ранее в работах [3], [4].

### 2. Оператор Хилла

Напомним необходимые сведения об операторе Хилла. Рассмотрим уравнение

$$-f''(x) + V(x)f(x) = \lambda f(x) \forall x \in \mathbb{R}, \quad (1)$$

где  $\lambda \in \mathbb{C}$ ,  $V \in L^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$  и  $V(x+1) = V(x)$  для всех  $x$ . Обозначим через  $\theta_x(\lambda)$  и  $\phi_x(\lambda)$  два фундаментальных решения уравнения (1), удовлетворяющих следующим граничным условиям

$$\theta_0 = \phi'_0 = 1, \quad \theta'_0 = \phi_0 = 0.$$

Общее решение уравнения можно записать в виде

$$f(x) = f(0)\theta_x + f'(0)\phi_x. \quad (2)$$

Отметим, что вронскиан

$$W(f, g) = \begin{vmatrix} f(x) & g(x) \\ f'(x) & g'(x) \end{vmatrix},$$

не зависит от  $x$ . В частности

$$\theta_x \phi'_x - \theta'_x \phi_x = 1, \quad (3)$$

и для каждого решения  $f$  уравнения (1),

$$f(0) = f(x)\phi'_x - f'(x)\phi_x, \quad (4)$$

$$f'(0) = -f(x)\theta'_x + f'(x)\theta_x. \quad (5)$$

Воспользовавшись (2), (3) мы вычисляем производные через значения в концах интервала:

$$f'(0) = -\frac{\theta_x}{\phi_x} f(0) + \frac{1}{\phi_x} f(x), \quad (6)$$

$$f'(x) = \theta'_x f(0) + \phi'_x f'(0) = f(0) \left[ \theta'_x - \frac{\theta_x \phi'_x}{\phi_x} \right] + f(x) \frac{\phi'_x}{\phi_x} = -\frac{1}{\phi_x} f(0) + \frac{\phi'_x}{\phi_x} f(x), \quad (7)$$

за исключением случая  $\lambda$ , принадлежащих спектру Дирихле  $\sigma_D = \{\lambda \in \mathbb{R} : \phi_1(\lambda) = 0\}$ .

Если  $f$  является решением уравнения (1), трансляция на 1 действует на  $f$  как линейный оператор, называемый матрицей монодромии  $M_0(\lambda)$ , а именно

$$\begin{pmatrix} f(1) \\ f'(1) \end{pmatrix} = M_0(\lambda) \begin{pmatrix} f(0) \\ f'(0) \end{pmatrix}, \quad M_0(\lambda) = \begin{pmatrix} \theta_1 & \phi_1 \\ \theta'_1 & \phi'_1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Матрица  $M_0(\lambda)$  оказывается симплектической.

Для  $\lambda \notin \sigma_D$  мы вводим новый базис с матрицей перехода  $R = \text{diag}(1, \phi_1)$ , который удобен при анализе графов типа «зигзаг» и «кресло». Всюду далее мы используем буквенное обозначение, например,  $A$  для матрицы оператора  $A$  в стандартном базисе, и обозначение с крышкой для  $\tilde{A} = RAR^{-1}$ . В этих обозначениях

$$\tilde{M}_0 = \begin{pmatrix} \theta_1 & \phi_1 \\ \theta'_1 \phi_1 & \phi'_1 \phi'_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \phi_1^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_1 & 1 \\ \theta'_1 \phi_1 & \phi'_1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{M}_0^{-1} = \begin{pmatrix} \theta_1 & -1 \\ -\theta'_1 \phi_1 & \phi'_1 \end{pmatrix}.$$

Если  $\theta_1 = \phi'_1 = \alpha$ , то справедливо

$$\tilde{M}_0 = \begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ \alpha^2 - 1 & \alpha \end{pmatrix}, \quad \tilde{M}_0^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 - \alpha^2 & \alpha \end{pmatrix}.$$

Предположим, что потенциал  $V$  четен, т.е.  $V(1-x) = V(x)$ . Тогда уравнение Хилла инвариантно относительно замены координат  $x \mapsto 1-x$ . Следовательно, если  $f$  является решением уравнения Хилла, то  $g$ , определённое как  $g(x) = f(1-x)$ , также является решением. Следовательно,

$$\begin{pmatrix} f(0) \\ -f'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(1) \\ g'(1) \end{pmatrix} = M_0(\lambda) \begin{pmatrix} g(0) \\ g'(0) \end{pmatrix} = M_0(\lambda) \begin{pmatrix} f(1) \\ -f'(1) \end{pmatrix},$$

или

$$\begin{pmatrix} f(0) \\ f'(0) \end{pmatrix} = KM_0(\lambda)K \begin{pmatrix} f(1) \\ f'(1) \end{pmatrix}, \quad K = \text{diag}(1, -1).$$

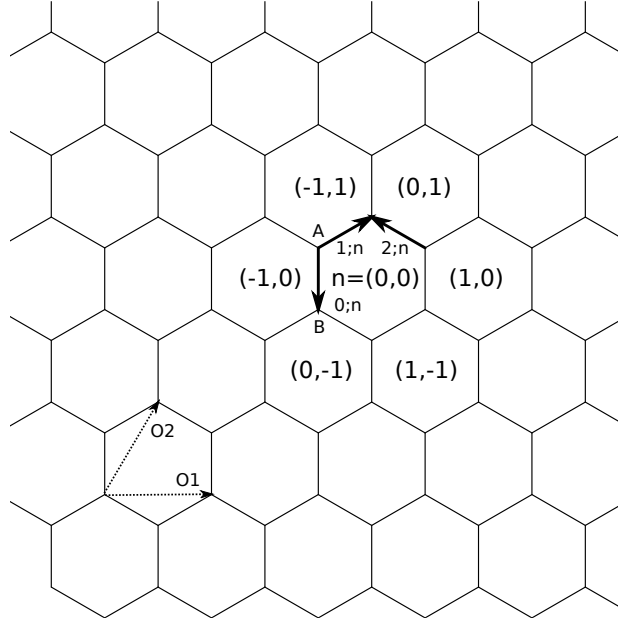


Рис. 1. Гексагональный граф

Используя эти уравнения вместе с (8), мы заключаем, что

$$M_0^{-1}(\lambda) = K M_0(\lambda) K,$$

т.е.  $K$  сплетает  $M_0$  с его обратным. В стандартном базисе

$$\begin{pmatrix} \phi'_1 & -\phi_1 \\ -\theta'_1 & \theta_1 \end{pmatrix} = M_0^{-1} = K M_0 K = \begin{pmatrix} \theta_1 & -\phi_1 \\ -\theta'_1 & \phi'_1 \end{pmatrix},$$

следовательно  $\phi'_1 = \theta_1 =: \alpha$ . Более того,

$$\tilde{M}_0 = \begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ \alpha^2 - 1 & \alpha \end{pmatrix}, \quad \tilde{M}_0^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 - \alpha^2 & \alpha \end{pmatrix}.$$

### 3. Гексагональная решетка

Все рассматриваемые в данной заметке графы получаются некоторым преобразованием гексагонального графа, который определяется в этом разделе. *Гексагональный граф*  $\Gamma$  – это квантовый граф, такой что его множество вершин совпадает в узлами гексагональной решётки, а его множество ребер состоит из всех сегментов, соединяющих соседние узлы гексагональной решётки (см. рисунок 1). Подобно гексагональной решётке, гексагональный граф  $\mathbb{Z}^2$ -периодический, мы будем обозначать образующие группы трансляций через векторы  $O_1$  и  $O_2$ . Наш граф можно разбить на подграфы (называемые *ячейками*), которые пересекаются лишь по граничным вершинам, и любую ячейку можно получить из другой, подействовав на нее элементом группы трансляций. Ячейки графа занумеруем парами  $n = (n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$ , причем ячейка  $n$  получается трансляцией фундаментальной ячейки, имеющей индексы  $(0, 0)$ , на вектор  $n_1 O_1 + n_2 O_2$ . Ячейка  $n$  состоит в точности из четырёх вершин  $A_n, B_n, B_{n+(0,1)}, B_{n+(-1,1)}$  и содержит ровно три ребра  $e_{0;n} = A_n - B_n$ ,  $e_{1;n} = A_n - B_{n+(0,1)}$ ,  $e_{2;n} = A_{n+(1,0)} - B_{n+(0,1)}$ , где  $V_1 - V_2$  обозначает ребро с началом в  $V_1$  и концом в  $V_2$ . Если не принимать в рассмотрение магнитное поле, нет необходимости фиксировать вложение нашего графа в трёхмерное пространство, так как вся метрическая информация кодируется в длинах ребер, которые мы будем считать равными единице,

так как изменение длины приводит лишь к перенормировке энергетической оси. По техническим причинам нам удобно зафиксировать ориентацию на графе. Пусть все ребра начинаются в вершинах  $A$  и заканчиваются в вершинах  $B$ ; очевидно, что таким образом мы получаем двудольный граф.

Пусть  $f$  некоторая функция на гексагональном графе  $\Gamma$ . Это означает, что функция  $f$  определена на ребрах  $e_{j;n}$ , где  $f_{j;n}$  суть сужения  $f$  на  $e_{j;n}$ , являющиеся комплекснозначными функциями на отрезке  $[0, 1]$ , причем значению  $f$  в нуле отвечает значение в начале ребра. Пространство  $C^1(\Gamma)$  непрерывно дифференцируемых функций на  $\Gamma$  состоит из функций  $f$ , таких что

- Все сужения  $f_{j;n}$  суть непрерывно дифференцируемые функции на  $[0, 1]$ .
- Значения в вершинах совпадают для всех сужений, т.е.  $f_{0;n}(0) = f_{1;n}(0) = f_{2;n-(1,0)}(0)$ ,  $f_{0;n+(1,0)}(1) = f_{1;n}(1) = f_{2;n}(1)$  для всех  $n$ .
- Сумма внешних производных во всех вершинах равна нулю, т.е.  $f'_{0;n}(0) + f'_{1;n}(0) + f'_{2;n-(1,0)}(0) = 0$ ,  $f'_{0;n+(1,0)}(1) + f'_{1;n}(1) + f'_{2;n}(1) = 0$  для всех  $n$ .

Эти условия обычно называются *условиями Кирхгофа*. Пространство  $L^2(\Gamma)$  квадратично интегрируемых функций определено обычным образом и состоит из функций  $f$ , таких что

- $f_{j;n} \in L^2([0, 1])$  для всех  $j, n$ .
- $\sum_{j,n} \|f_{j;n}\|^2 < \infty$ , где  $\|\cdot\|$  обозначает  $L^2$ -норму функций на  $[0, 1]$ .

Рассмотрим оператор  $S$ , действующий на функции  $f \in C^1(\Gamma)$  по правилу

$$Sf_{j;n}(x) = -f''_{j;n}(x) + V(x)f_{j;n}(x),$$

для всех  $j, n$  и  $x \in (0, 1)$ . Будем считать, что потенциал  $V$  является вещественнозначной интегрируемой функцией на  $[0, 1]$ . *Гамильтониан*  $H$  на гексагональном графе  $\Gamma$  определен как сужение оператора  $S$  на  $\text{dom } H = \text{dom } S \cap L^2(\Gamma)$ . Легко убедиться, что оператор  $H$  самосопряжен.

Далее мы работаем с так называемыми фактор-графами, которые мы сейчас и определим. Отношение эквивалентности  $\sim$  на множестве вершин графа  $\Gamma$  называется *отношением эквивалентности на графе*  $\Gamma$ , если  $\sigma$  сохраняет ребра, т.е. если для каждого ребра  $v_1 \rightarrow v_2$ , и вершин  $v'_1 \sim v_1, v'_2 \sim v_2$ , ребро  $v'_1 \rightarrow v'_2$  также принадлежит множеству ребер графа  $\Gamma$ , более того  $v_1 \rightarrow v_2$  и  $v'_1 \rightarrow v'_2$  имеют одинаковую длину. По определению, *фактор-графом*  $\Gamma/\sim$  называют квантовый граф, множество ребер и вершин которого образовано классами эквивалентности множеств ребер и вершин графа  $\Gamma$ , задаваемыми отношением эквивалентности  $\sim$ . *Киральным графом типа*  $(N_1, N_2)$  называется фактор-граф  $\Gamma/\sim$ , где  $\Gamma$  — гексагональный граф, и  $v_1 \sim v_2$ , если и только если  $v_2$  является трансляцией  $v_1$  на вектор, кратный *вектору киральности*  $N_1O_1 + N_2O_2$ . Так как мы задали одинаковые граничные условия во всех вершинах гексагонального графа, так же как и одинаковые потенциалы на всех ребрах графа, ясно, что мы имеем оператор гамильтона на каждом киральном графе, действующий на каждом ребре как оператор  $S$ , и определенный на функциях, удовлетворяющий граничным условиям Кирхгофа.

#### 4. Граф типа «зигзаг»

*Графом типа зигзаг*  $\Gamma_N^z$  называют квантовый граф, получаемый из гексагональной решетки  $\Gamma$  отождествлением всех вершин и ребер, получаемых трансляцией на вектор  $2NO_1$ . Следует отметить, что граф типа «зигзаг» имеет ту же структуру, что и однослойная углеродная нанотрубка с киральностью  $(2N, 0)$ . Развертка графа «зигзаг» показана на рисунке 2.

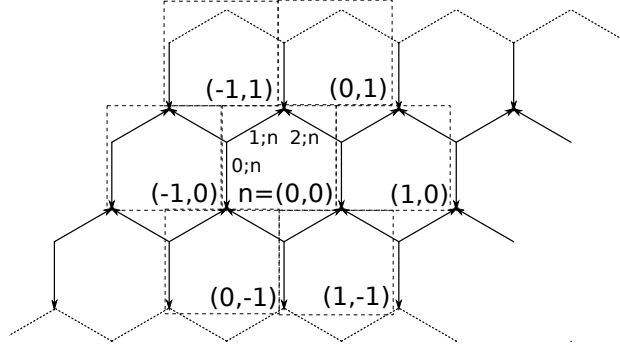


Рис. 2. Граф типа зигзаг

Для произвольной функции  $f$  на  $\Gamma_N^z$ , мы определяем вектор-функцию  $F_{j;k}(x) = (f_{j;n,k}(x))_{n=0}^{2N-1}$ . Далее все действия с индексом  $n$  выполняются по модулю  $2N$ , т.е.  $2N = 0$ . В терминах  $F$  условия Кирхгофа можно записать так

$$F_{0;k}(0) = F_{1;k}(0) = LF_{2;k}(0), \quad F'_{0;k}(0) + F'_{1;k}(0) + LF'_{2;k}(0) = 0. \quad (9)$$

$$F_{0;k+1}(1) = F_{1;k}(1) = F_{2;k}(1), \quad F'_{0;k+1}(1) + F'_{1;k}(1) + F'_{2;k}(1) = 0, \quad (10)$$

где  $S$  – оператор циклического сдвига  $Lf_{j;n,k} = f_{j;n-1,k}$ . Так как граф «зигзаг» инвариантен относительно вращений на угол  $\frac{\pi}{N}$ , условия Кирхгофа могут быть разделены переходом к собственным подпространствам оператора  $L$ . Однако, так как рассматриваемый в следующем разделе гамильтониан на графе типа «кресло» инвариантен лишь относительно вращений на угол  $\frac{2\pi}{N}$ , мы будем принимать во внимание лишь эту меньшую группу инвариантности. Введем функции

$$\tilde{F}_{j;n,k}(x) = \begin{pmatrix} F_{j;2n,k}(x) \\ F_{j;2n+1,k}(x) \end{pmatrix}, \quad \tilde{F}'_{j;k}(x) = (\tilde{F}_{j;n,k}(x))_{n=0}^{N-1}.$$

Тогда условия Кирхгофа имеют вид

$$\tilde{F}_{0;k}(0) = \tilde{F}_{1;k}(0) = \tilde{L}\tilde{F}_{2;k}(0), \quad \tilde{F}'_{0;k}(0) + \tilde{F}'_{1;k}(0) + \tilde{L}\tilde{F}'_{2;k}(0) = 0.$$

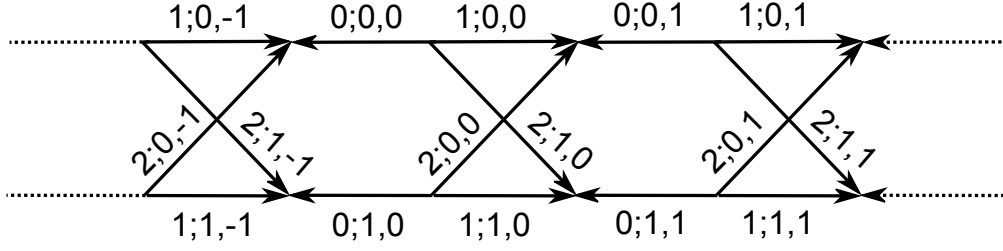
$$\tilde{F}_{0;k+1}(1) = \tilde{F}_{1;k}(1) = \tilde{F}_{2;k}(1), \quad \tilde{F}'_{0;k+1}(1) + \tilde{F}'_{1;k}(1) + \tilde{F}'_{2;k}(1) = 0,$$

где все матричные элементы матрицы  $\tilde{L}$  зануляются, кроме

$$\tilde{L}_{n,n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_{n,n-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим преобразование Фурье  $\mathcal{F}: \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N$ , матричные элементы которого в стандартном базисе задаются  $\mathcal{F}_{n,n'} = N^{-\frac{1}{2}}s^{-nn'}$ , где  $s = \exp(-\frac{2\pi}{N}i)$ . Так как  $\hat{L}$  действует как свертка ( $\hat{L}_{n,k} = \hat{L}_{n-k,0}$ ), ее преобразование Фурье  $\hat{L}$  имеет диагональную матрицу, в самом деле,

$$\begin{aligned} \hat{L}_{n,k} &= (\mathcal{F}L\tilde{\mathcal{F}}^{-1})_{n,k} = \frac{1}{N} \sum_{n',k'=0}^{N-1} s^{-nn'+kk'} \tilde{L}_{n',k'} = \frac{1}{N} \sum_{n',k'=0}^{N-1} s^{-nn'+kk'} \tilde{L}_{n'-k',0} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n',k'=0}^{N-1} s^{-n(n'+k')+kk'} \tilde{L}_{n',0} = \frac{1}{N} \sum_{n'=0}^{N-1} \tilde{L}_{n',0} s^{-nn'} \sum_{k'=0}^{N-1} s^{(n-k)k'} = \delta_{n,k} \hat{L}_n, \quad (11) \end{aligned}$$


 РИС. 3. Граф типа «зигзаг»  $\Gamma_1^z$ . Тройки  $j; n, k$  нумеруют носители функций  $\hat{f}_{j;n,k}$ 

таким образом  $\hat{L} = \text{diag}_n(\hat{L}_n)$ , где

$$\hat{L}_n = \sum_{n'=0}^{N-1} s^{-nn'} \tilde{L}_{n',0} = \begin{pmatrix} 0 & s^{-n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Переходя к образам Фурье

$$\hat{F}_{j;k}(x) = (\mathcal{F} \otimes 1_2) \tilde{F}_{j;k}(x) = \begin{pmatrix} \mathcal{F}(F_{j;2n,k}(x))_{n=0}^{N-1} \\ \mathcal{F}(F_{j;2n+1,k}(x))_{n=0}^{N-1} \end{pmatrix},$$

условия Кирхгофа переписываются в виде

$$\hat{F}_{0;k}(0) = \hat{F}_{1;k}(0) = \hat{L} \hat{F}_{2;k}(0), \quad \hat{F}'_{0;k}(0) + \hat{F}'_{1;k}(0) + \hat{L} \hat{F}'_{2;k}(0) = 0.$$

$$\hat{F}_{0;k+1}(1) = \hat{F}_{1;k}(1) = \hat{F}_{2;k}(1), \quad \hat{F}'_{0;k+1}(1) + \hat{F}'_{1;k}(1) + \hat{F}'_{2;k}(1) = 0.$$

Так как  $\hat{L}$  разложено в прямую сумму, естественно переписать условия Кирхгофа для каждого значения квазиимпульса  $p$  отдельно. Обозначим

$$\hat{f}_{j;k;p}(x) = \begin{pmatrix} \hat{f}_{j;0,k;p}(x) \\ \hat{f}_{j;1,k;p}(x) \end{pmatrix}, \quad \hat{f}_{j;l,k;p}(x) = (\mathcal{F}(f_{j;l+2n,k})_{n=0}^{N-1})_p, \quad \hat{F}_{j;k}(x) = (\hat{f}_{j;k;p}(x))_{p=0}^{N-1}.$$

Мы окончательно переписываем условия Кирхгофа в виде: для всех  $k, p$ ,

$$\hat{f}_{0;k;p}(0) = \hat{f}_{1;k;p}(0) = \hat{L}_p \hat{f}_{2;k;p}(0), \quad \hat{f}'_{0;k;p}(0) + \hat{f}'_{1;k;p}(0) + \hat{L}_p \hat{f}'_{2;k;p}(0) = 0, \quad (12)$$

$$\hat{f}_{0;k+1;p}(1) = \hat{f}_{1;k;p}(1) = \hat{f}_{2;k;p}(1), \quad \hat{f}'_{0;k+1;p}(1) + \hat{f}'_{1;k;p}(1) + \hat{f}'_{2;k;p}(1) = 0. \quad (13)$$

Следовательно, гамильтониан  $H$  на графе «зигзаг» унитарно эквивалентен прямой сумме операторов  $H_p$  по  $p = 0..N-1$ , где  $H_p$  действует на графе «зигзаг»  $\Gamma_1^z$  с  $N=1$  (см. рисунок 3), т.е. действующий на функциях  $(\hat{f}_{j;k;p})_{j,k}$ , удовлетворяющих (12) и (13), следующим образом

$$H_p f_{j;k;p} = -f''_{j;k;p}(x) + V(x) f_{j;k;p}(x).$$

Далее мы фиксируем и выбрасываем (для краткости) из обозначений  $p$ , т.е.  $\hat{f}_{j;k;p} = \hat{f}_{j;k}$ . Перейдем к анализу уравнения

$$-\hat{f}''_{j;k}(x) + V(x) \hat{f}_{j;k}(x) = \lambda \hat{f}_{j;k}(x), \quad (14)$$

где  $\hat{f} \in C^1(\Gamma_1^z)$  и  $\hat{f}$  удовлетворяют (12), (13), т.е. мы ищем обобщённые собственные функции оператора  $H_p$ . Покажем, как можно исключить из рассмотрения сужения  $\hat{f}_{j;k}$  с

$j = 1, 2$ . Для этого выпишем условия Кирхгофа (12), (13) для каждой компоненты  $\hat{f}_{j;k}(x) = (\hat{f}_{j;0,k}(x), \hat{f}_{j;1,k}(x))^T$ . А именно,

$$\begin{aligned} \hat{f}_{0;0,k}(0) &= \hat{f}_{1;0,k}(0) = s^p \hat{f}_{2;1,k}(0), & \hat{f}'_{0;0,k}(0) + \hat{f}'_{1;0,k}(0) + s^p \hat{f}'_{2;1,k}(0) &= 0, \\ \hat{f}_{0;1,k}(0) &= \hat{f}_{1;1,k}(0) = \hat{f}_{2;0,k}(0), & \hat{f}'_{0;1,k}(0) + \hat{f}'_{1;1,k}(0) + \hat{f}'_{2;0,k}(0) &= 0, \\ \hat{f}_{0;j,k+1}(1) &= \hat{f}_{1;j,k}(1) = \hat{f}_{2;j,k}(1), & \hat{f}'_{0;j,k+1}(1) + \hat{f}'_{1;j,k}(1) + \hat{f}'_{2;j,k}(1) &= 0, \quad \forall j, k. \end{aligned} \quad (15)$$

Положим  $\lambda \notin \sigma_D$ . Воспользовавшись (2), (4), (5), (6), (7), получим

$$\begin{aligned} \hat{f}_{j;k}(x) &= \hat{f}_{j;k}(0)\theta_x + \hat{f}'_{j;k}(0)\phi_x, & \hat{f}'_{j;k}(1) &= \hat{f}_{j;k}(0)\theta'_1 + \hat{f}'_{j;k}(0)\phi'_1, \\ \hat{f}'_{j;k}(0) &= \frac{1}{\phi_1}\hat{f}_{j;k}(1) - \frac{\theta_1}{\phi_1}\hat{f}_{j;k}(0), & \hat{f}'_{j;n}(1) &= -\frac{1}{\phi_1}\hat{f}_{j;n}(0) + \frac{\phi'_1}{\phi_1}\hat{f}_{j;k}(1). \end{aligned}$$

В силу (12),

$$\begin{aligned} \hat{f}'_{0;0}(0) + \hat{f}'_{1;0}(0) + \hat{L}_p \hat{f}'_{2;0}(0) &= \hat{f}'_{0;0}(0) + \frac{1}{\phi_1}(\hat{f}_{1;0}(1) + \hat{L}_p \hat{f}_{2;0}(1) - (\hat{f}_{1;0}(0) + \hat{L}_p \hat{f}_{0;1}(0))\theta_1) \\ &= \hat{f}'_{0;0}(0) + \frac{1}{\phi_1}(\hat{f}_{0;1}(1) + \hat{L}_p \hat{f}_{0;1}(1) - (\hat{f}_{0;0}(0) + \hat{f}_{0;0}(0))\theta_1) = 0 \end{aligned}$$

Следовательно

$$(1 + \hat{L}_p)\hat{f}_{0;1}(1) + \phi_1 \hat{f}'_{0;0}(0) - 2\theta_1 \hat{f}_{0;0}(0) = 0. \quad (16)$$

В силу (13),

$$\begin{aligned} \hat{f}'_{0;1}(1) + \hat{f}'_{1;0}(1) + \hat{f}'_{2;0}(1) &= \hat{f}'_{0;1}(1) + \frac{1}{\phi_1}(-\hat{f}_{1;0}(0) - \hat{f}_{2;0}(0) + \phi'_1(\hat{f}_{1;0} + \hat{f}_{2;0}(1))) \\ &= \hat{f}'_{0;1}(1) - \frac{1}{\phi_1}(1 + \hat{L}^{-1})\hat{f}_{0;0}(0) + \frac{2\phi'_1}{\phi_1}\hat{f}_{0;1}(1). \end{aligned}$$

Поэтому

$$\phi_1 \hat{f}'_{0;1}(1) - (1 + \hat{L}_p^{-1})\hat{f}_{0;0}(0) + 2\phi'_1 \hat{f}_{0;1}(1) = 0. \quad (17)$$

Таким образом, уравнения (16), (17) дают граничные условия на  $\hat{f}_{0;k}$ , следовательно компоненты  $\hat{f}_{1;k}$ ,  $\hat{f}_{2;k}$  можно исключить из рассмотрения.

Заметим, что для  $p \neq 0$  решения уравнения (14) однозначно восстанавливаются, если известны  $\hat{f}_{0;0}$ ; с другой стороны для  $p = 0$  решение уравнения (14) на ячейке не зависит от его поведения на других ячейках. Рассмотрим сначала случай  $p \neq 0$ . Непосредственные вычисления доказывают, что

$$\begin{aligned} 1 + \hat{L}_p &= \begin{pmatrix} 1 & s^{-p} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, & \hat{L}_p^{-1} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ s^p & 0 \end{pmatrix}, & (1 + \hat{L}_p)^{-1} &= \frac{1}{1 - s^{-p}} \begin{pmatrix} 1 & -s^{-p} \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \\ (1 + \hat{L}_p)(1 + \hat{L}_p^{-1}) &= \begin{pmatrix} 1 & s^{-p} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ s^p & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 + s^p \\ 1 + s^{-p} & 2 \end{pmatrix}, & \hat{L}_p + \hat{L}_p^{-1} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 + s^{-p} \\ 1 + s^p & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Тогда (16), (17) равносильны соотношениям

$$\hat{f}_{0;1}(1) = 2\theta_1(1 + \hat{L}_p)^{-1}\hat{f}_{0;0}(0) - \phi_1(1 + \hat{L}_p)^{-1}\hat{f}'_{0;0}(0),$$

$$\begin{aligned} \hat{f}'_{0;1}(1) &= \frac{1}{\phi_1}(1 + \hat{L}_p^{-1})\hat{f}_{0;0}(0) - 2\frac{\phi'_1}{\phi_1}\hat{f}_{0;1}(1) \\ &= \left( \frac{1}{\phi_1}(1 + \hat{L}_p^{-1}) - \frac{4\theta_1\phi'_1}{\phi_1}(1 + \hat{L}_p)^{-1} \right) \hat{f}_{0;0}(0) + 2\phi'_1(1 + \hat{L}_p)^{-1}\hat{f}'_{0;0}(0). \end{aligned}$$

Следовательно, существует матрица перехода  $T_p^z(\lambda)$ , такая что

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_{0;1}(1) \\ \hat{f}'_{0;1}(1) \end{pmatrix} = T_p^z(\lambda) \begin{pmatrix} \hat{f}_{0;0}(0) \\ \hat{f}'_{0;0}(0) \end{pmatrix},$$

имеющая следующий явный вид

$$T_p^z = [1_2 \otimes (1 + \hat{L}_p)^{-1}] \begin{pmatrix} 2\theta_1 1_2 & -\phi_1 1_2 \\ (\hat{L}_p + \hat{L}_p^{-1} + 2(1 - 2\theta_1 \phi'_1) 1_2) \phi_1^{-1} & 2\phi'_1 1_2 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Так как на отрезке  $(0, 1)$  функция  $\hat{f}_{0;0}$  является решением уравнения (1), матрица монодромии оператора  $H_p$  имеет вид

$$M_p^z(\lambda) = [M_0(\lambda)^{-1} \otimes 1] T_p^z(\lambda).$$

Матрица  $T_0^z$  имеет полюса, однако эти особенности можно исключить с помощью преобразования подобия  $R = \text{diag}(1, \phi_1)$ ,  $\tilde{R} = R \otimes 1_2$ , а именно

$$T_p^z = \tilde{R}^{-1} \tilde{T}_p^z \tilde{R}, \quad \tilde{T}_p^z = [1_2 \otimes (1 + \hat{L}_p)^{-1}] \begin{pmatrix} 2\theta_1 1_2 & -1_2 \\ \hat{L}_p + \hat{L}_p^{-1} + 2(1 - 2\theta_1 \phi'_1) 1_2 & 2\phi'_1 1_2 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Заметим, что матрица  $\tilde{T}_p^z$ , вообще говоря, не симплектическая.

Рассмотрим случай  $p = 0$ . Разложим  $\hat{f}_{0;k}$  по собственному базису оператора  $\hat{L}_0$ ,

$$\hat{f}_{0;k}(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} g_{0;k}(x) + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} g_{1;k}(x).$$

Очевидно, что функция  $g_{0;\cdot}$  удовлетворяет (14) для всех  $j$ , и граничные условия (16), (17) принимают вид

$$2g_{0;1}(1) + \phi_1 g'_{0;0}(0) - 2\theta_1 g_{0;0}(0) = 0, \quad \phi_1 g'_{0;1}(1) - 2g_{0;0}(0) + 2\phi'_1 g_{0;1}(1) = 0. \quad (20)$$

Следовательно

$$\begin{aligned} g'_{0;1}(1) &= \frac{2}{\phi_1} g_{0;0}(0) - 2\frac{\phi'_1}{\phi_1} g_{0;1}(1) = \frac{2}{\phi_1} g_{0;0}(0) + \frac{\phi'_1}{\phi_1} (\phi_1 g'_{0;0}(0) - 2\theta_1 g_{0;0}(0)) \\ &= \frac{2}{\phi_1} g_{0;0}(0) + \phi'_1 g'_{0;0}(0) - 2\frac{\phi'_1 \theta_1}{\phi_1} g_{0;0}(0) = -2\theta'_1 g_{0;0}(0) + \phi'_2 g'_{0;0}(0) \end{aligned}$$

Таким образом, найдется матрица перехода  $T_0^z(\lambda)$ , такая что

$$\begin{pmatrix} g_{0;1}(1) \\ g'_{0;1}(1) \end{pmatrix} = T_0^z(\lambda) \begin{pmatrix} g_{0;0}(0) \\ g'_{0;0}(0) \end{pmatrix}, \quad T_0^z = \begin{pmatrix} \theta_1 & -\frac{\phi_1}{2} \\ -2\theta'_1 & \phi'_1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Наконец, решения можно продолжить, воспользовавшись матрицей монодромии  $M_0^z(\lambda)$ , такой что

$$\begin{pmatrix} g_{0;1}(0) \\ g'_{0;1}(0) \end{pmatrix} = M_0^z(\lambda) \begin{pmatrix} g_{0;0}(0) \\ g'_{0;0}(0) \end{pmatrix}, \quad M_0^z(\lambda) = M_0^{-1}(\lambda) T_0^z(\lambda). \quad (22)$$

Однако, для компоненты  $g_{1;k}$  ситуация в корне иная. А именно, уравнения (16), (17) влекут, что

$$\phi_1 g'_{1;k}(0) - 2\theta_1 g_{1;k}(0) = 0, \quad \phi_1 g'_{1;k}(1) + 2\phi'_1 g_{1;k}(1) = 0 \forall k. \quad (23)$$

Следовательно, мы имеем семейство независимых задач на отрезках  $[0, 1]$ . Очевидно, если для некоторого  $\lambda$  найдется решение уравнения (23), то  $\lambda$  будет собственным значением оператора  $H_0$ . В силу (2), второе уравнение можно переписать в виде

$$(g_{1,k}(0)\theta'_1 + g'_{1,k}(0)\phi'_1)\phi_1 + 2(g_{1,k}(0)\theta_1 + g'_{1,k}(0)\phi_1)\phi'_1 = 0,$$



$$\begin{aligned}(\phi_1 \theta_1' + 2\phi_1' \theta_1)g_{1,k}(0) + 3\phi_1' \Phi_1 g_{1,k}'(0) &= 0, \\(3\theta_1 \phi_1' - 1)g_{1,k}(0) + 3\phi_1 \phi_1' g_{1,k}'(0) &= 0.\end{aligned}$$

Принимая во внимание первое уравнение, из системы (23) мы получаем

$$(9\theta_1 \phi_1' - 1)g_{1,k}(0) = 0.$$

Множитель  $g_{1,k}(0)$  зануляется лишь на  $\lambda \in \sigma_D$ , которые мы проанализируем ниже. Таким образом, мы получили уравнение на собственные значения оператора  $H_0$ , отличные от  $\sigma_D$ :

$$9\theta_1 \phi_1' = 1.$$

На данный момент мы описали все решения уравнения (14) для всех случаев за исключением  $\lambda \in \sigma_D$ . Теперь рассмотрим  $\lambda \in \sigma_D$ . Мы доказали, что  $\lambda$  является собственным значением оператора  $H_p$  для всех  $p$  и нашли собственный базис. В рассматриваемом базисе

$$\theta_1 \hat{f}_{j;k}(0) = \hat{f}_{j;k},$$

следовательно, в силу условий непрерывности, входящих в условия Кирхгофа (12), (13), мы получаем что  $\hat{f}_{j;k}(0) = 0$ . Следовательно  $\hat{f}_{j;k}(x) = c_{j;k} \phi_x$ , или в координатах:

$$\hat{f}_{j;0,k}(x) = c_{j;0,k} \phi_x, \quad \hat{f}_{j;1,k}(x) = c_{j;1,k} \phi_x.$$

Тогда вторая часть условий Кирхгофа (12), (13) принимает вид

$$\begin{aligned}c_{0;0,k} + c_{1;0,k} + s^p c_{2;1,k} &= 0, & c_{0;1,k} + c_{1;1,k} + c_{2;0,k} &= 0, \\c_{0;0,k+1} + c_{1;0,k} + c_{2;0,k} &= 0, & c_{0;1,k+1} + c_{1;0,k} + c_{2;0,k} &= 0.\end{aligned}$$

Прямой подстановкой убеждаемся, что функции  $\hat{f} = \phi_k^z$ , такие что  $\hat{f}_{j;0,k}$  зануляются, за исключением

$$\hat{f}_{2;0,k} = \hat{f}_{1;0,k+1} = \hat{f}_{0;1,k+1} = \phi, \quad \hat{f}_{0;0,k+1} = \hat{f}_{2;0,k+1} = \hat{f}_{1;1,k} = -\phi,$$

являются собственными функциями  $H_p$  для каждого  $p$ . Форма остальных собственных функций зависит от  $p$ . Рассмотрим произвольное решение  $\hat{f}$ , и пусть

$$\tilde{f} = \hat{f} - \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{f}_{0;0,k+1}(x) \phi_k.$$

Рассмотрим  $p = 0$ . Тогда функции  $f = \psi_k^z$ , зануляющиеся всюду, кроме

$$f_{1;0,k} = f_{1;1,k} = \phi, \quad f_{2;0,k} = f_{2;1,k} = -\phi,$$

являются собственными значениями оператора  $H_0$  (см. рисунок 4). Вычитая функции  $\phi_k^z$  из  $f$ , получаем гораздо более простое выражение. В самом деле, сужения на  $(0; 0, k)$  зануляются для всех  $k$  (см. рисунок 5 (а)). Пусть  $\bar{f} = \tilde{f} - \sum_{k \in \mathbb{Z}} \tilde{f}_{1;0,k} \psi_k^z$ ; очевидно,  $\bar{f}$  зануляются на ребрах  $(1; 0, k)$  для всех  $k$  (рисунок 5 (б)). Однако, в силу условий Кирхгофа  $\hat{f}_2$  равно нулю на ребрах  $(2; j, k)$  для всех  $j, k$  (см. рисунок 5 (с)). Окончательно,  $\bar{f}$  имеет носителями  $(0; 1, k)$ ,  $(1; 1, k)$ . В силу условий Кирхгофа

$$\bar{f}_{0;1,k} = -\bar{f}_{1;1,k} = \bar{f}_{0;1,k+1} \forall k.$$

В силу включения для каждой собственной функции  $\bar{f} \in L^2(\Gamma_1^z)$ , мы заключаем, что  $\bar{f} = 0$ . Таким образом, в каждом собственном подпространстве, отвечающем собственному значению Дирихле, множество функции  $\phi_k^z, \psi_k^z, k \in \mathbb{Z}$ , является базисом.

Теперь рассмотрим  $p \neq 0$ . Тогда мы определим собственный базис  $\psi_k^z$  следующим образом:  $\hat{f} = \psi_k^z$  обнуляется всюду, кроме

$$\hat{f}_{1;0,k} = \hat{f}_{2;0,k-1} = \phi, \quad \hat{f}_{2;0,k} = \hat{f}_{1;1,k-1} = \hat{f}_{1;0,k-1} = -\phi,$$

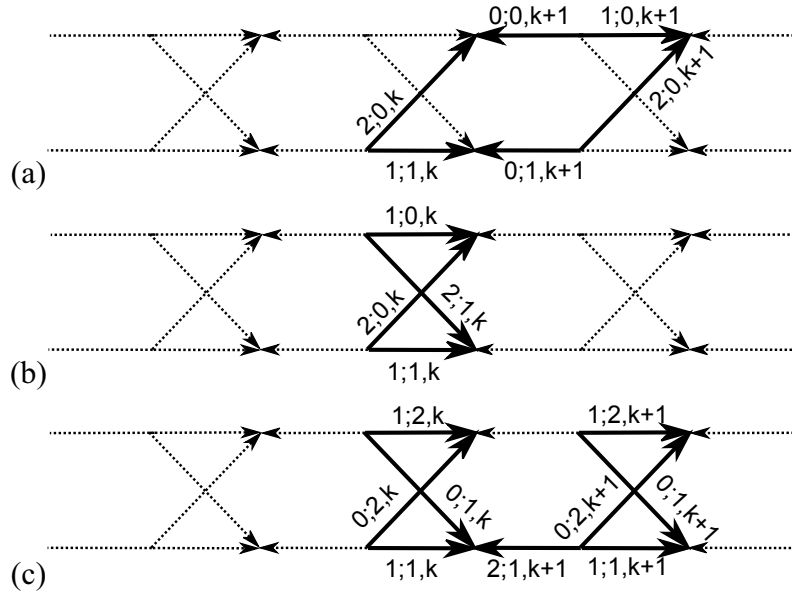


РИС. 4. Носители локализованных состояний спектра Дирихле «зигзаг» графа  $\Gamma_1^z$ : (а) для функций  $\phi_k^z$  для всех  $p$ ; (б) для  $\psi_k^z$ ,  $p = 0$ ; (с) для  $\psi_k^z$ ,  $p \neq 0$

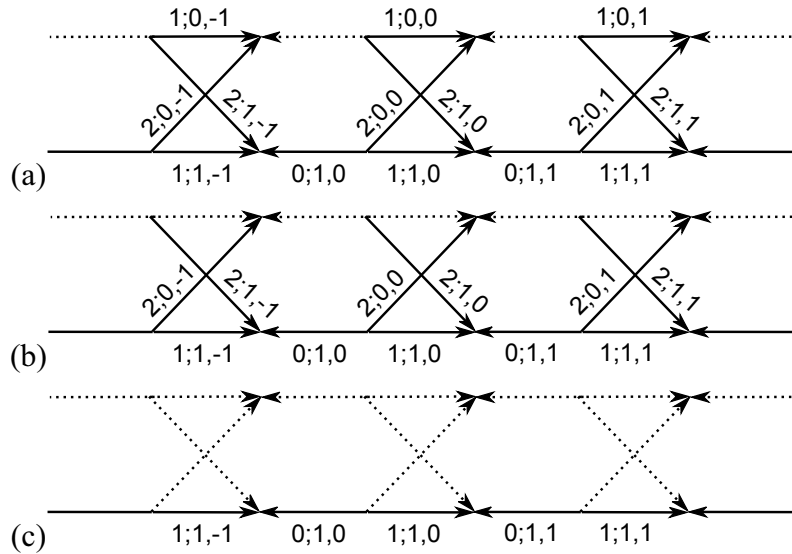


РИС. 5. Редуцированные носители собственных функций спектра Дирихле графа типа «зигзаг»  $\Gamma_1^z$ . (а) носители для  $\hat{f}$ ; (б) носители для  $\tilde{f}$  (с) более точные носители для  $\tilde{f}$

$$\hat{f}_{2;1,k} = -s^{-p}\phi, \quad \hat{f}_{1;1,k} = \hat{f}_{2;1,k-1} = s^p\phi, \quad \hat{f}_{0;1,k} = (1 - s^{-p})\phi,$$

(см. рисунок 4 (с)). Доказательство того, что все  $\phi_k^z$  и  $\psi_k^z$  образуют собственный базис, аналогично.

#### 4.1. Симметрии

Отображение  $\Lambda^z: f \rightarrow g$ , определённое по правилу

$$g_{0;n,k}(x) = f_{0;-1-n,-k}(1-x), \quad g_{1;n,k}(x) = f_{1;-1-n,-k-1}(1-x), \quad g_{2;n,k}(x) = f_{2;-n,-k-1}(1-x),$$

задает действие на функциях на графе типа «зигзаг» группы центральных симметрий. В определённых выше векторных обозначениях,

$$G_{0;k}(x) = LTF_{0;-k}(1-x), \quad G_{1;k}(x) = LTF_{1;-k-1}(1-x), \quad G_{2;k}(x) = TF_{2;-k-1}(1-x),$$

где  $Te_k = e_{-k}$ . Воспользовавшись явным видом обратного преобразования

$$f_{0;n,k}(x) = g_{0;-1-n,-k}(1-x), \quad f_{1;n,k}(x) = g_{1;-1-n,-k-1}(1-x), \quad f_{2;n,k}(x) = g_{2;-n,-k-1}(1-x),$$

$$F_{0;k}(x) = LTG_{0;-k}(1-x), \quad F_{1;k}(x) = LTG_{1;1-k}(1-x), \quad F_{2;k}(x) = TG_{2;-k+1}(1-x),$$

мы получаем уравнения на каждую функцию  $f$ , удовлетворяющую условиям Кирхгофа, (9), (10)

$$\begin{aligned} LTG_{0;-k}(1) &= LTG_{1;-1-k}(1) = LTG_{2;-1-k}(1), \\ -LTG'_{0;-k}(1) - LTG'_{1;-1-k}(1) - LTG'_{2;-1-k}(1) &= 0. \\ LTG_{0;-k-1}(0) &= LTG_{1;-1-k}(0) = TG_{2;-1-k}(0), \\ LTG'_{0;-k-1}(0) - LTG'_{1;-1-k}(0) - TG'_{2;-1-k}(0) &= 0. \end{aligned}$$

Так как  $LT = TL^{-1}$ , мы видим, что  $G$  удовлетворяет (9), (10), т.е. условия Кирхгофа инвариантны относительно  $\Lambda^z$ .

Предположим теперь, что  $V$  чётно, т.е.  $V(x) = V(1-x)$ . Тогда дифференциальное выражение  $-\frac{d^2}{dx^2} + V$  инвариантно относительно замены  $x \mapsto 1-x$ . Следовательно, мы заключаем, что  $\Lambda^z H^z = H^z \Lambda^z$ . Найденная нами симметрия накладывает некоторые ограничения на матрицу монодромии. В самом деле, рассмотрим решение  $F$  уравнения  $H^z F = \lambda F$ . В силу отмеченной симметрии,  $G = \Lambda^z F$  также является решением этого уравнения. Обозначим через  $\Pi_k^z$  следующий оператор, определенный

$$\Pi_k^z: F \mapsto \begin{pmatrix} F_{0;k} \\ F'_{0;k} \end{pmatrix}.$$

Предположим пока, что матрица монодромии существует, тогда

$$\Pi_{k+1}^z G(0) = M^z(\lambda) \Pi_k^z G(0).$$

Следовательно,

$$\Pi_{k+1}^z \Lambda^z F(0) = M^z(\lambda) \Pi_k^z \Lambda^z F(0).$$

Очевидно,  $\Pi_k^z \Lambda^z F(x) = (K \otimes (LT)) \Pi_{-k}^z F(1-x)$  где  $K = \text{diag}(1, -1)$ . Тогда

$$(K \otimes LT) \Pi_{-k-1}^z F(1) = M^z(\lambda) (K \otimes LT) \Pi_{-k}^z F(1).$$

Так как  $\Pi_k^z F$  является решением уравнения Хилла,

$$(KM_0(\lambda) \otimes LT) \Pi_k^z F(0) = M^z(\lambda) (KM_0(\lambda) \otimes LT) \Pi_{k+1}^z F(0),$$

Воспользовавшись снова определением матрицы монодромии, мы получаем

$$M^z(\lambda)^{-1} = K^z(\lambda)^{-1} M^z(\lambda) K^z(\lambda), \quad K^z(\lambda) = KM_0(\lambda) \otimes LT.$$

Однако, мы знаем, что матрица монодромии существует только на подпространстве пространства всех начальных условий для  $p \neq 0$ . Чтобы отделить это пространство мы применяем преобразование Фурье,

$$\hat{M}^z(\lambda)^{-1} = \hat{K}^z(\lambda)^{-1} \hat{M}^z(\lambda) \hat{K}^z(\lambda), \quad \hat{K}^z(\lambda) = KM_0(\lambda) \otimes \hat{L}\hat{T}. \quad (24)$$

Преобразование Фурье от  $L$ , найденное выше, представляет собой прямую сумму операторов  $\hat{L}^p$ , и преобразование Фурье от  $T$  может быть легко посчитано

$$\hat{L}^p = \begin{pmatrix} 0 & s^{-p} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

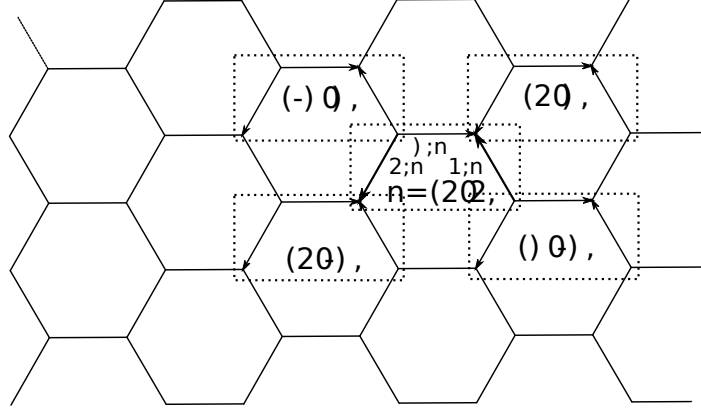


РИС. 6. Развертка графа типа «кресло»

$$\mathcal{F}T\mathcal{F}_{j,k}^{-1} = \frac{1}{N} \sum_{j',k'=1}^N s^{-jj'+kk'} T_{j',k'} = \frac{1}{N} \sum_{j',k'=1}^N s^{-jj'+kk'} I \delta_{j',-k'} = I \delta_{j,-k} = T.$$

Ранее мы доказали, что  $\hat{M}^z = \bigoplus_{p=0}^{N-1} M_p^z$ , поэтому мы окончательно получаем

$$M_p^z(\lambda)^{-1} = \hat{K}_p^z(\lambda)^{-1} M_{-p}^z(\lambda) \hat{K}_p^z(\lambda), \quad \hat{K}_p^z(\lambda) = (K M_0(\lambda)) \otimes (\hat{L}_p I). \quad (25)$$

Воспользовавшись явной формулой для  $M_p^z(\lambda)$ , можно доказать, что

$$M_{-p}^z(\lambda) = \bar{M}_p^z(\lambda), \quad \lambda \in \mathbb{R},$$

где  $\bar{M}$  обозначает комплексно-сопряжённую к  $M$  матрицу. Наконец, для вещественных  $\lambda$  и четного потенциала  $V$ ,

$$\hat{K}_p^z(\lambda) M_p^z(\lambda)^{-1} = \bar{M}_p^z(\lambda) \hat{K}_p^z(\lambda).$$

## 5. Граф типа «кресло»

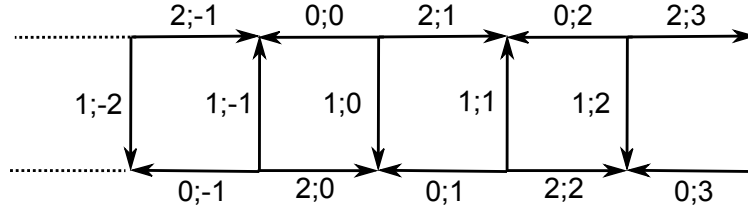
Графом типа «кресло»  $\Gamma_N^a$  называется киральный граф типа  $(N, N)$ . Развертка графа «кресло» состоит из ребер  $(j; n, k)$ , таких что  $j \in \{0, 1, 2\}$ ,  $k \in \mathbb{Z}$  и  $k \leq n < k + N$  (см. рисунок 6). Фундаментальная область графа типа «кресло» состоит из трех ребер, и граф инвариантен относительно перестановки ячеек по правилу  $n \mapsto n + (1, 1)$ . Нам удобно рассматривать произвольную функцию  $f$  на графе типа кресло, как векторную функцию  $F_{j;k}(x) = (f_{j;n,k}(x))_{n=0}^{N-1}$ . Тогда условия Кирхгофа принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} F_{0;k}(0) = F_{1;k}(0) = L F_{2;k+1}(0), & \quad F'_{0;k}(0) + F'_{1;k}(0) + L F'_{2;k+1}(0) = 0, \\ F_{0;k+1}(1) = F_{1;k}(1) = F_{2;k}(1), & \quad F'_{0;k+1}(1) + F'_{1;k}(1) + F'_{2;k}(1) = 0, \end{aligned}$$

где  $L$  обозначает оператор сдвига  $L f_n = f_{n-1}$ . Мы ищем обобщённые собственные функции гамильтониана  $H^a$  графа «кресло»  $\Gamma_N^a$ , т.е. мы решаем уравнение

$$-F''_{j;k}(x) + V(x) F_{j;k}(x) = \lambda F_{j;k}(x), \quad (26)$$

вместе с граничными условиями Кирхгофа. Воспользовавшись симметрией графа, мы можем расцепить данную систему уравнений. Пусть  $\hat{F}_{j;k}(x) = \mathcal{F} F_{j;k}(x)$ , где  $\mathcal{F}$  обозначает преобразование Фурье на  $\mathbb{Z}$  определённое в предыдущем разделе. Обозначим через  $\hat{f}_{j;k;p}(x)$

РИС. 7. Граф типа «кресло»  $\Gamma_1^a$ 

компоненты вектора  $\hat{F}_{j;k}(x) = (\hat{f}_{j;k;p}(x))_{p=0}^{N-1}$ . Очевидно, каждая функция  $\hat{f}_{j;k;p}$  удовлетворяет (26), и условия Кирхгофа принимают вид

$$\hat{f}_{0;k;p}(0) = \hat{f}_{1;k;p}(0) = s^p \hat{f}_{2;k+1;p}(0), \quad (27)$$

$$\hat{f}'_{0;k;p}(0) + \hat{f}'_{1;k;p}(0) + s^p \hat{f}'_{2;k+1;p}(0) = 0, \quad (28)$$

$$\hat{f}_{0;k+1;p}(1) = \hat{f}_{1;k;p}(1) = \hat{f}_{2;k;p}(1), \quad (29)$$

$$\hat{f}'_{0;k+1;p}(1) + \hat{f}'_{1;k;p}(1) + \hat{f}'_{2;k;p}(1) = 0. \quad (30)$$

Мы видим, что функции  $\hat{f}_{\cdot;\cdot;p}$  не связаны при различных  $p$ . Это означает, что гамильтониан  $H^a$  унитарно эквивалентен прямой сумме гамильтонианов  $H_p^a$  на графе  $\Gamma_1^a$  (см. рисунок 7) с чуть более сложными граничными условиями, чем условия Кирхгофа.

Далее мы фиксируем и выбрасываем (для краткости) из обозначений  $p$ , например,  $\hat{f}_{j;k} = \hat{f}_{j;k;p}$ . Положим  $\lambda \notin \sigma_D$ . В силу (29) мы имеем

$$\hat{f}_{0;k}(1) = \hat{f}_{2;k}(1) = \theta_1 \hat{f}_{2;k} + \phi_1 \hat{f}'_{2;k}(0). \quad (31)$$

Воспользовавшись (27), мы получаем

$$\hat{f}_{2;k+1}(0) - s^{-p} \hat{f}_{0;k}(0) = \phi'_1 s^{-p} \hat{f}_{0;k}(1) - \phi_1 s^{-p} \hat{f}'_{0;k}(1). \quad (32)$$

В силу (27) и (29),

$$\begin{aligned} \hat{f}'_{1;k}(0) &= \frac{1}{\phi_1} \hat{f}_{1;k}(1) - \frac{\theta_1}{\phi_1} \hat{f}_{1;k}(0) \\ &= \frac{1}{\phi_1} \hat{f}_{2;k}(1) - \frac{\theta_1}{\phi_1} \hat{f}_{0;k}(0) = \frac{1}{\phi_1} (\theta_1 \hat{f}_{2;k}(0) + \phi_1 \hat{f}'_{2;k}(0)) - \frac{\theta_1}{\phi_1} (\phi'_1 \hat{f}_{0;k}(1) - \phi_1 \hat{f}'_{0;k}(1)) \\ &= \frac{\theta_1}{\phi_1} \hat{f}_{2;k}(0) + \hat{f}'_{2;k}(0) - \left( \frac{1}{\phi_1} + \theta'_1 \right) \hat{f}_{0;k}(1) + \theta_1 \hat{f}'_{0;k}(1). \end{aligned} \quad (33)$$

Из (28) мы заключаем

$$\begin{aligned} \hat{f}'_{2;k+1}(0) &= -s^{-p} \hat{f}'_{0;0}(0) - s^{-p} \hat{f}'_{1;k}(0) \\ &= -s^{-p} (\theta_1 \hat{f}'_{0;k}(1) - \theta'_1 \hat{f}_{0;0}(1)) - s^{-p} \left( \frac{\theta_1}{\phi_1} \hat{f}_{2;k}(0) + \hat{f}'_{2;k}(0) - \left( \frac{1}{\phi_1} + \theta'_1 \right) \hat{f}_{0;k}(1) + \theta_1 \hat{f}'_{0;0}(1) \right) \\ &= (2\theta'_1 + \frac{1}{\phi_1} s^{-p} \hat{f}_{0;k}(1) - 2\theta_1 s^{-p} \hat{f}'_{0;k}(1) - \frac{\theta_1}{\phi_1} s^{-p} \hat{f}_{2;k}(0) - s^{-p} \hat{f}'_{2;k}(0)). \end{aligned} \quad (34)$$

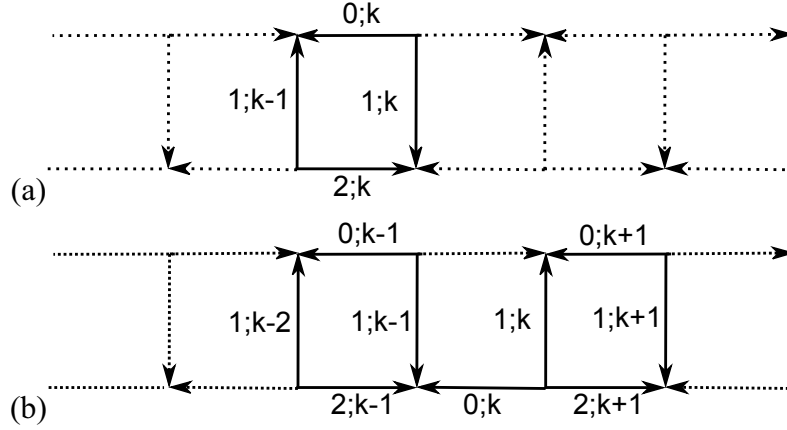


РИС. 8. Носители функций  $\phi^a$  из собственного базиса, отвечающего спектру Дирихле: (а) для  $p = 0$  (б) для  $p \neq 0$

Из (30) мы получаем

$$\begin{aligned}
 \hat{f}'_{0;k+1}(1) &= -\hat{f}'_{1;0}(1) - \hat{f}'_{2;k}(1) \\
 &= \frac{\phi'_1}{\phi_1} \hat{f}_{0;k}(1) - \hat{f}'_{0;k}(1) - \left(\frac{1}{\phi_1} + \theta'_1\right) \hat{f}_{2;k}(0) - \phi'_1 \hat{f}'_{2;k}(0) - \theta'_1 \hat{f}_{2;k}(0) - \phi'_1 \hat{F}'_{2;k}(0) \\
 &= \frac{\phi'_1}{\phi_1} \hat{f}_{0;k}(1) - \hat{f}'_{0;k}(1) - \left(\frac{1}{\phi_1} + 2\theta'_1\right) \hat{f}_{2;k}(0) - 2\phi'_1 \hat{f}'_{2;k}(0). \quad (35)
 \end{aligned}$$

Таким образом, мы видим, что решение может быть продолжено из любой ячейки для каждого  $p$ , и матрица монодромии  $M_p^a$  имеет вид

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_{0;k+1} \\ \hat{f}_{2;k+1}(0) \\ -\hat{f}'_{0;k+1}(1) \\ \hat{f}'_{2;k+1}(0) \end{pmatrix} = M_p^a(\lambda) \begin{pmatrix} \hat{f}_{0;k} \\ \hat{f}_{2;k}(0) \\ -\hat{f}'_{0;k}(1) \\ \hat{f}'_{2;k}(0) \end{pmatrix}, \quad M_p^a = \begin{pmatrix} 0 & \theta_1 & 0 & \phi_1 \\ \phi'_1 s^{-p} & 0 & \phi_1 s^{-p} & 0 \\ -\frac{\phi'_1}{\phi_1} & 2\theta'_1 \frac{1}{\phi_1} & -1 & 2\phi'_1 \\ (2\theta'_1 + \frac{1}{\phi_1}) s^{-p} & -\frac{\theta_1}{\phi_1} s^{-p} & 2\theta_1 s^{-p} & -s^{-p} \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Следует отметить, что матрицу монодромии можно представить в виде произведения матрицы  $P_p = \text{diag}(1, s^{-p}, 1, s^{-p})$ , зависящий только от  $p$ , и матрицы, не зависящей от  $p$ . Более того, особенности последней матрицы можно исключить заменой базиса  $R = \text{diag}(1, 1, \phi_1, \phi_1)$ . А именно,

$$M_p^a = P_p R^{-1} \tilde{M}^a R, \quad \tilde{M}^a = \begin{pmatrix} 0 & \theta_1 & 0 & 1 \\ \phi'_1 & 0 & 1 & 0 \\ -\phi'_1 & 2\phi_1 \theta'_1 + 1 & -1 & 2\phi'_1 \\ 2\phi_1 \theta'_1 + 1 & -\theta_1 & 2\theta_1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Остается рассмотреть  $\lambda \in \sigma_D$ . Покажем, что каждая  $\lambda \in \sigma_D$  является собственным числом оператора  $H_p^a$  для всех  $p$  и найдем собственные базисы. Для таких  $\lambda$  мы имеем  $\hat{f}_{j;k}(1) = \hat{f}_{j;k}(0)$ , следовательно, в силу условий Кирхгофа,  $\hat{f} \in L^2(\Gamma_1^a)$  влечет, что  $\hat{f}_{j;k}(0) = 0$ , и поэтому  $\hat{f}_{j;k}(x) = c_{j;k} \phi_x$ . Вид собственного базиса зависит от  $p$ .

Рассмотрим  $p = 0$ . Тогда, очевидно,  $\hat{f} = \phi_k^a$ , обнуляющаяся всюду, кроме

$$\hat{f}_{0;k} = \hat{f}_{2;k} = \phi, \quad \hat{f}_{1;k} = \hat{f}_{1;k-1} = -\phi,$$

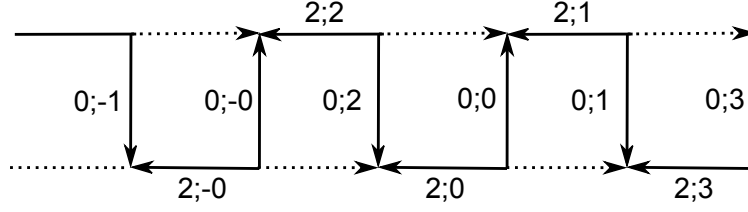


Рис. 9. Носитель разности  $\tilde{f}$  между обобщенной собственной функцией гамильтониана графа типа «кресло»  $\Gamma_1^a$ , отвечающей спектру Дирихле, и ее проекциями на функции  $\phi_k^a$

является собственной функцией (см. рисунок 8 (а)). Рассмотрим  $\hat{f}$ , произвольную собственную функцию для этого собственного числа  $\lambda$ , и рассмотрим  $\tilde{f} = \hat{f} - \sum_{k \in \mathbb{Z}} f'_{0;k}(0) \phi_k^a$ . Функция  $\tilde{f}$  тождественно равна нулю на ребрах  $(0; k)$  для всех  $k$ , следовательно, ее носитель имеет вид ломаной без самопересечений (см. рисунок 9). Более того, в силу условий Кирхгофа

$$\tilde{f}_{1;k} = -\tilde{f}_{2;k} = \tilde{f}_{1;k+1} \forall k,$$

это означает, что  $\tilde{f} \in L^2$  только, если  $\tilde{f} = 0$ . Таким образом, мы заключаем, что набор из всех  $\phi_k^a$  образует собственный базис.

Теперь рассмотрим  $p \neq 0$ . В этом случае мы имеем семейство собственных функций  $\phi_k^a$ , таких, что  $\hat{f} = \phi_k^a$  обнуляется всюду, кроме

$$\begin{aligned} \hat{f}_{0;k} &= (s^p - 1)\phi, & \hat{f}_{2;k+1} &= \hat{f}_{0;k+1} = \hat{f}_{1;k-1} = \phi, \\ \hat{f}_{1;k+1} &= \hat{f}_{0;k-1} = -\phi, & \hat{f}_{1;k} &= \hat{f}_{2;k-1} = -s^p\phi, & \hat{f}_{1;k-2} &= s^p\phi. \end{aligned}$$

Процедура, аналогичная проделанной для  $p = 0$ , доказывает, что набор всех функций  $\phi_k^a$  образует собственный базис.

### 5.1. Симметрии

Отображение  $\Lambda^a: f \rightarrow g$  определение формулами

$$G_{0;k}(x) = LTF_{0;-k}(1-x), \quad G_{1;k}(x) = LTF_{1;-k-1}(1-x), \quad G_{2;k}(x) = TF_{2;-k}(1-x),$$

где  $Te_k = e_{-k}$ , задает действие группы центральных симметрий функций на графе типа «кресло». Во введенных ранее векторных обозначениях, пользуясь явным видом обратного преобразования,

$$F_{0;k}(x) = LTF_{0;-k}(1-x), \quad F_{1;k}(x) = LTF_{1;-k-1}(1-x), \quad F_{2;k}(x) = TF_{2;-k}(1-x),$$

мы заключаем, что для всех  $f$ , удовлетворяющих условиям Кирхгофа (27), (28), справедлив тождества

$$\begin{aligned} LTF_{0;-k}(1) &= LTF_{1;-k-1}(1) = LTF_{2;-k}(1), \\ -LTF'_{0;-k}(1) - LTF'_{1;-k-1}(1) - LTF'_{2;-k}(1) &= 0, \\ LTF_{0;-k-1}(0) &= LTF_{1;-k-1}(0) = LTF_{2;-k}(0), \\ LTF'_{0;-k-1}(0) - LTF'_{1;-k-1}(0) - LTF'_{2;-k}(0) &= 0. \end{aligned}$$

Так как  $LT = TL^{-1}$ , мы видим, что  $G$  удовлетворяет (27), (28), т.е. условия Кирхгофа инвариантны относительно  $\Lambda^a$ .

Теперь предположим, что  $V$  четно:  $V(x) = V(1-x)$ . Тогда дифференциальное выражение  $-\frac{d^2}{dx^2} + V$  инвариантно относительно замены координат  $x \mapsto 1-x$ , откуда мы заключаем, что  $\Lambda^a H^a = H^a \Lambda^a$ . Найденная нами симметрия накладывает ограничения на

матрицу монодромии. В самом деле, рассмотрим решение  $F$  уравнения  $H^a F = \lambda F$ . В силу отмеченной нами симметрии  $G = \Lambda^a F$  также является решением этого уравнения. Обозначим через  $\Pi_k^a$  оператор, заданный

$$\Pi_k^a : F \mapsto \begin{pmatrix} F_{0;k}(1-x) \\ F_{2;k}(x) \\ -F'_{0;k}(1-x) \\ F'_{2;k}(x) \end{pmatrix}.$$

По определению матрицы монодромии,

$$\Pi_{k+1}^a G(0) = M^a(\lambda) \Pi_k^a G(0).$$

Следовательно,

$$\Pi_{k+1}^a \Lambda^a F(0) = M^a(\lambda) \Pi_k^a \Lambda^a F(0).$$

Очевидно,

$$\Pi_k^a \Lambda^a F(x) = \begin{pmatrix} \Lambda^a F_{0;k}(1-x) \\ \Lambda^a F_{2;k}(x) \\ -(\Lambda^a F'_{0;k}(1-x)) \\ (\Lambda^a F'_{2;k}(x)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} LTF_{0;-k}(x) \\ TF_{2;-k}(1-x) \\ LTF'_{0;-k}(x) \\ -TF'_{2;-k}(1-x) \end{pmatrix} = K^a \Pi^a F(1-x), \quad (38)$$

где  $K^a = (K \otimes \text{diag}(LT, T))(Y \text{diag}(M_0^{-1}, M_0)Y \otimes 1_N)$ ,  $K = \text{diag}(1, -1)$ ,

$$Y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$K^a \Pi_{-k-1}^a F(1) = M^a(\lambda) K^a \Pi_{-k}^a F(1).$$

Воспользовавшись снова определением матрицы монодромии, получаем

$$M^a(\lambda)^{-1} = K^a(\lambda)^{-1} M^a(\lambda) K^a(\lambda).$$

Применяя преобразование Фурье, выводим

$$\begin{aligned} M_p^a(\lambda)^{-1} &= \hat{K}_p^a(\lambda)^{-1} M_{-p}^a(\lambda) \hat{K}_p^a(\lambda), \\ \hat{K}_p^a(\lambda) &= (K \otimes \text{diag}(\hat{L}_p I, I))(Y \text{diag}(M_0^{-1}, M_0)Y \otimes 1_2). \end{aligned} \quad (39)$$

Воспользовавшись явным выражением для  $M_p^a(\lambda)$ , заключаем, что

$$M_{-p}^a(\lambda) = \bar{M}_p^a(\lambda), \quad \lambda \in \mathbb{R},$$

где  $\bar{M}$  обозначает комплексно сопряженную к  $M$  матрицу. Окончательно, для вещественных  $\lambda$  и четных потенциалов  $V$ ,

$$\hat{K}_p^a(\lambda) M_p^a(\lambda)^{-1} = \bar{M}_p^a(\lambda) \hat{K}_p^a(\lambda).$$



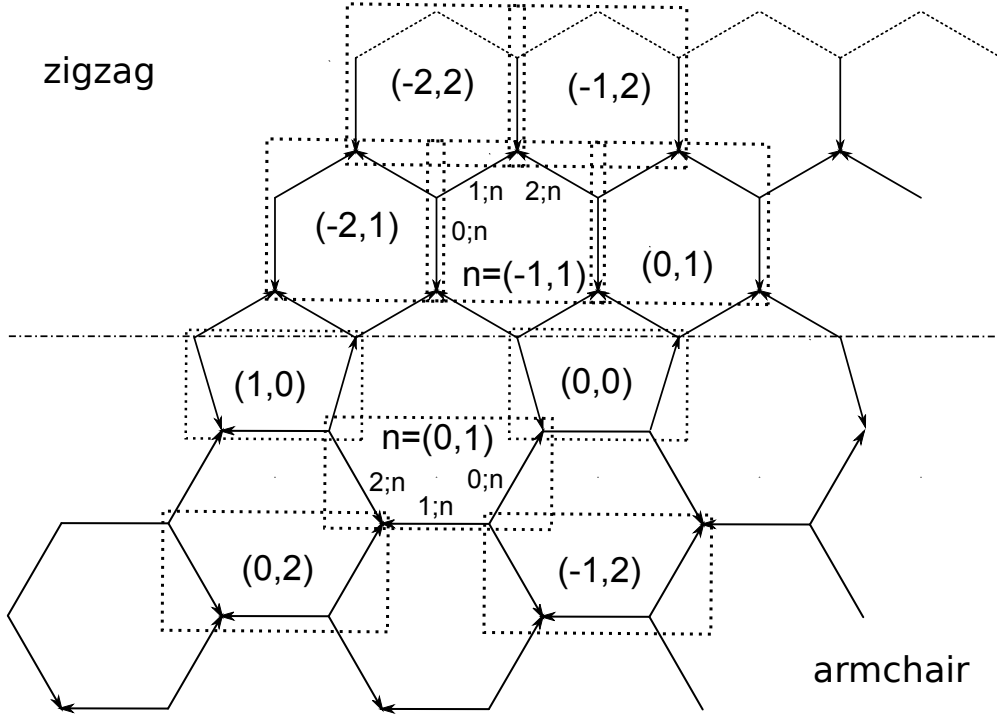


Рис. 10. Развертка сочленения графов типа «кресло» и «зигзаг»

## 6. Сочленение графов типа «зигзаг» и «кресло»

Пусть  $\Gamma_N^z$  и  $\Gamma_N^a$  графы типа «зигзаг» и «кресло» определенные в предыдущих разделах, соответственно. Мы рассматриваем графы разных типов с одинаковым числом ребер в фундаментальной ячейке. Далее мы будем добавлять букву  $z$  ко всем объектам, имеющим отношение к графу типа зигзаг, и букву  $a$ , к объектам, относящимся к графу «кресло», например,  $(z; j; n, k)$  обозначает ребро  $(j; n, k)$  графа  $\Gamma_N^z$ . Сочленением  $\Gamma_N$  графов  $\Gamma_N^z$  и  $\Gamma_N^a$  называется квантовый граф, состоящий из всех ребер  $(z; j; n, k)$  и  $(a; j; n, k)$  с  $n \geq 0$  и произвольными  $j, k$ , в котором ребра  $(z; 0; 2k, 0)$  отождествляются с  $(a; 2; -k, 0)$ , и  $(z; 0; 2k+1, 0)$  с противоположно направленным к  $(a; 0; -k, 0)$  для всех  $k$  (см. рисунок 10). Структура графа  $\Gamma_N$  аналогично структуре сочленения двух однослойных трубок типа «зигзаг» и «кресло» (см. рисунок 11).

Пусть  $S$  обозначает оператор в  $C^1(\Gamma_N)$ , действующий на ребрах по правилу

$$Sf_{\nu;j;n,k}(x) = -f''_{\nu;j;n,k}(x) + V(x)f_{\nu;j;n,k}(x).$$

Мы определим гамильтониан  $H$  на  $\Gamma_N$  как сужение оператора  $S$  на  $\text{dom } H = \text{dom } S \cap L^2(\Gamma_N)$ . Очевидно, что  $H$  действует как  $H^a$  на функциях с носителем только на ребрах из графа  $\Gamma^a$ , и как  $H^z$  на функциях с носителем на ребрах из графа  $\Gamma^z$ .

Проверим, что непрерывный спектр оператора  $H$  совпадает с объединением спектров операторов  $\Gamma^z$  и  $\Gamma^a$ . В самом деле, пусть  $S_0^z$  обозначает сужение оператора  $H^z$  на функции  $f$ , такие что

$$f_{0;n,0}(0) = f'_{0;n,0}(0) = 0 \forall n,$$

и пусть  $S_0^a$  обозначает сужение оператора  $H^a$  на функции  $f$ , такие что

$$f_{2;n,0}(0) = f'_{2;n,0}(0) = 0, \quad f_{0;n,0}(1) = f'_{0;n,0}(1) = 0.$$

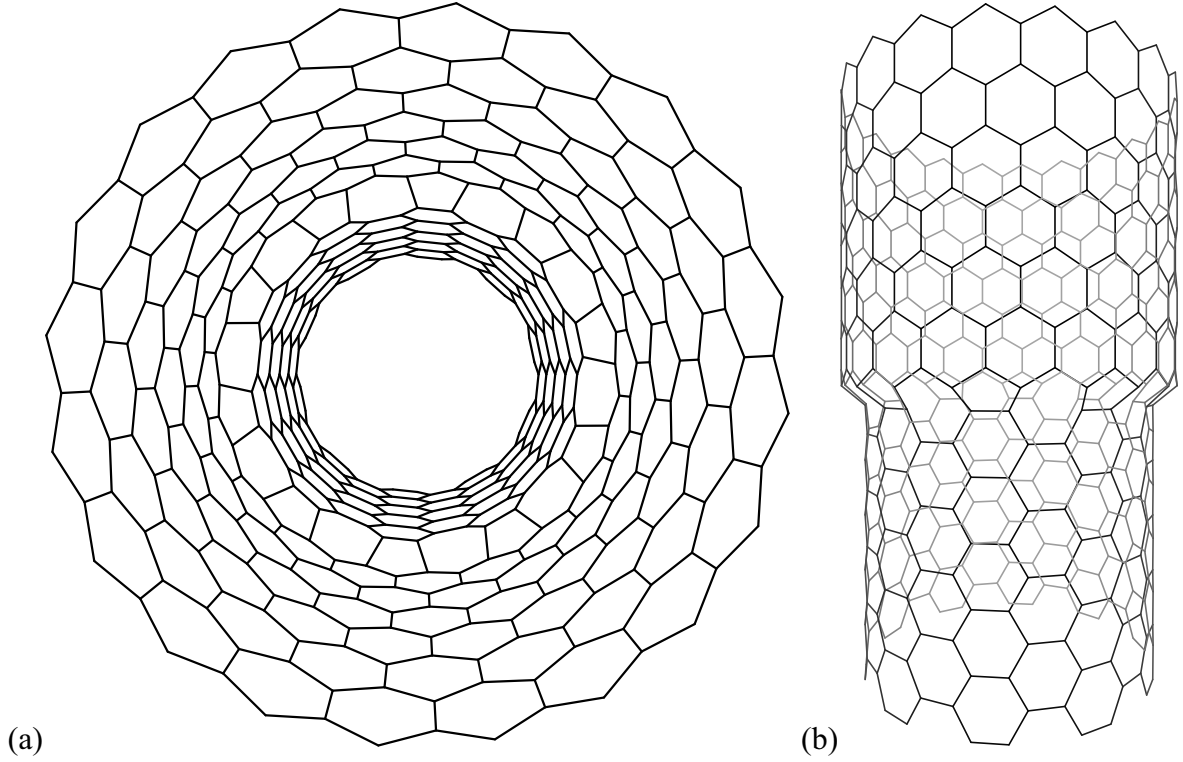


РИС. 11. Сочленения графов типа «кресло» и «зигзаг» для  $N = 20$ : (а) вид с оси симметрии, (б) вид сбоку

Очевидно,  $S_0^z = S_<^z \oplus S_>^z$ , где  $S_>^z$  действует на ребрах  $(j; n, k)$  с  $n \geq 0$ , и  $S_<^z$  – на ребрах  $(j; n, k)$  с  $n < 0$ ; подобно  $S_0^a = S_<^a \oplus S_>^a$ . Легко видеть, что  $H$  является самосопряженным расширением оператора  $S_>^a \oplus S_>^z$ . Так как индексы дефекта операторов  $S_0^a$  и  $S_0^z$  конечны, мы имеем  $\text{spes } H = \text{spes } H^a \cap \text{spes } H^z$ .

Следовательно, остается найти точечный спектр и собственные значения. Начнем со спектрального уравнения

$$-f''_{\nu;j;n,k}(x) + V(x)f_{\nu;j;n,k}(x) = \lambda f_{\nu;j;n,k}(x), \quad (40)$$

где функция  $f$  удовлетворяет условиям Кирхгофа и следующим уравнениям склейки

$$\begin{aligned} f_{a;2;-k,0}(0) &= f_{z;0;2k,0}(0), & f'_{a;2;-k,0}(0) &= f'_{z;0;2k,0}(0), \\ f_{a;0;-k,0}(1) &= f_{z;0;2k+1,0}(0), & -f'_{a;0;-k,0}(1) &= f'_{z;0;2k+1,0}(0) \quad \forall k. \end{aligned}$$

Снова удобно перейти к векторным обозначениям

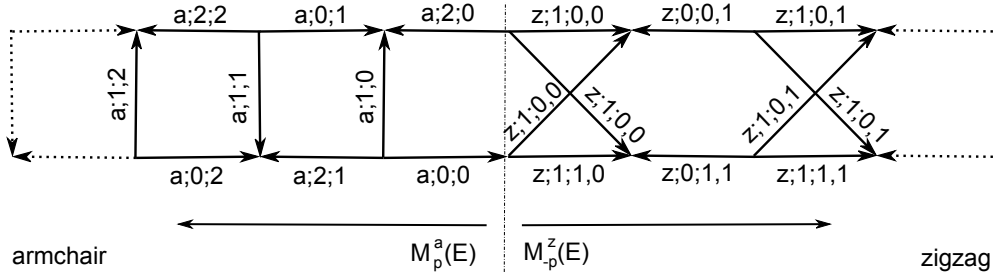
$$F_{a;n} = (F_{a;k,n})_{k=0}^{N-1}, \quad F_{a;k,n} = \begin{pmatrix} f_{a;2;k,n}(0) \\ f_{a;0;k,n}(1) \end{pmatrix}, \quad F'_{a;n} = (F'_{a;k,n})_{k=0}^{N-1}, \quad F'_{a;k,n} = \begin{pmatrix} f'_{a;2;k,n}(0) \\ -f'_{a;0;k,n}(1) \end{pmatrix}, \quad (41)$$

$$F_{z;n} = (F_{z;k,n})_{k=0}^{N-1}, \quad F_{z;k,n} = \begin{pmatrix} f_{z;0;2k,n}(0) \\ f_{z;0;2k+1,n}(1) \end{pmatrix}, \quad F'_{z;n} = (F'_{z;k,n})_{k=0}^{N-1}, \quad F'_{z;k,n} = \begin{pmatrix} f'_{z;0;2k,n}(0) \\ f'_{z;0;2k+1,n}(1) \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Тогда условия склейки принимают следующий простой вид

$$F_{a;0} = Y F_{z;0}, \quad F'_{a;0} = Y F'_{z;0},$$

где  $Y f_n = f_{-n}$  где  $-n = -n \pmod{N}$ .

Рис. 12. Сочленение  $\Gamma_1$  графов типа «кресло» и «зигзаг»

Граф  $\Gamma_N$  инвариантен при перестановках ребер  $(\nu; j; k, n) \mapsto (\nu; j; k + 1, n)$ , так же как и графы  $\Gamma^a$  и  $\Gamma^z$ , и следовательно, мы снова можем воспользоваться теорией Блоха-Флоке. Пусть  $\hat{F}_{\nu;n} = \mathcal{F}F_{\nu;n}$ ,  $\hat{F}'_{\nu;n} = \mathcal{F}F'_{\nu;n}$  для  $\nu = a, z$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ , где  $\mathcal{F}$  обозначает преобразование Фурье на  $\mathbb{Z}$ , определённое выше. Так как

$$\mathcal{F}^{-1}Y\mathcal{F}_{nk} = \frac{1}{N} \sum_{n',k'=0}^{N-1} s^{-nn'+kk'} \delta_{n',-k'} = \frac{1}{N} \sum_{n'=0}^{N-1} s^{-n'(n+k)} = \delta_{n',-k'},$$

т.е.  $\mathcal{F}^{-1}Y\mathcal{F} = Y$ , условия Кирхгофа принимают вид

$$\hat{F}_{a;0} = T\hat{F}_{z;0}, \quad \hat{F}'_{a;0} = T\hat{F}'_{z;0},$$

или в координатном виде  $\hat{F}_{\nu;n} = (\hat{f}_{\nu;n;p})_{p=0}^{N-1}$ ,  $\hat{F}'_{\nu;n} = (\hat{f}'_{\nu;n;p})_{p=0}^{N-1}$ ,

$$\hat{f}_{a;0;p} = \hat{f}_{z;0;-p}, \quad \hat{f}'_{a;0;p} = \hat{f}'_{z;0;-p} \quad \forall p. \quad (43)$$

Как было показано ранее, граничные условия для  $\hat{f}_{a;,\cdot}$  и  $\hat{f}_{z;,\cdot}$  так же разделяются (одинаковы при различных  $p$ ), следовательно, оператор  $H$  унитарно эквивалентен прямой сумме операторов  $H_p$ , где каждый оператор  $H_p$  действует на  $\Gamma_1$  с граничными условиями, отвечающими данному фиксированному  $p$  (см. рисунок 12). Далее мы фиксируем и выбрасываем из обозначений  $p$ , т.е.  $\hat{f}_{a;n} = \hat{f}_{a;n;p}$  и  $\hat{f}_{z;n} = \hat{f}_{z;n;-p}$ .

Следует отметить, что граф  $\Gamma_N$  не является двумерным, в отличие от его составных частей  $\Gamma_N^a$  и  $\Gamma_N^z$ , следовательно, естественно считать потенциал  $V$  четным, т.е.  $V(x) = V(1-x)$ . В этом случае мы имеем  $\phi'_1 = \theta_1 =: \alpha$ .

Начнём описание собственных значений  $\lambda \in \text{spec}_D$ . Очевидно, собственные функции  $\phi_k^z, \psi_k^z$ ,  $k \geq 0$ , и  $\phi_k^a$ ,  $k > 0$ , для графов «кресло» и «зигзаг», описанные выше, будут удовлетворять уравнению на обобщённые собственные функции для  $k > 0$ , т.е. там, где их носитель не пересекается с областью склейки. Следовательно, каждая  $\lambda \in \sigma_D$  является собственной функцией оператора  $H_p$ . Пусть  $\hat{f}$  является произвольной собственной функцией, отвечающей такому  $\lambda$ . Вычитая  $\phi_k^z, \psi_k^z$ ,  $k \geq 0$ , и  $\phi_k^a$ ,  $k > 0$  из  $\hat{f}$  как описано выше, мы получаем новую собственную функцию  $\tilde{f}$ , носитель которой сосредоточен на ребрах  $(a; 0, 0)$ ,  $(a; 1, 0)$ ,  $(a; 2, 0)$  (см. рисунок 13). Так как носитель функции  $\tilde{f}$  не содержит циклов, функция  $\tilde{f}$  тождественно равна нулю. Таким образом собственный базис формируется функциями  $\phi_k^a$ ,  $k > 0$  и  $\phi_k^z, \psi_k^z$ ,  $k \geq 0$ .

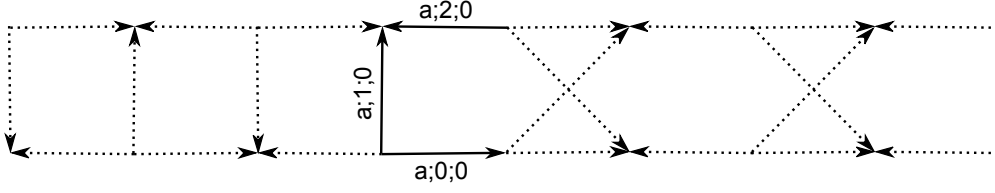


РИС. 13. Собственные функции оператора  $H_p$  отвечающие спектру Дирихле, отличные от собственных чисел операторов  $H_p^a$  и  $H_{-p}^z$ , должны иметь носитель, заключённый в отмеченной области. Однако, область не содержит циклов и, следовательно, не допускает собственных функций

## 7. Собственные значения, не входящие в спектр Дирихле

### 7.1. Случай $p \neq 0$

Рассмотрим собственные значения  $\lambda \notin \sigma_D$ . Для таких  $\lambda$  существует матрица монодромии для  $H^a$ , следовательно, мы имеем

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_{a;k+1} \\ \hat{f}'_{a;k+1} \end{pmatrix} = M_p^a(\lambda) \begin{pmatrix} \hat{f}_{a;k} \\ \hat{f}'_{a;k} \end{pmatrix}, \quad \tilde{M}^a = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 & 1 \\ \alpha & 0 & 1 & 0 \\ -\alpha & 2\alpha^2 - 1 & -1 & 2\alpha \\ 2\alpha^2 - 1 & -\alpha & 2\alpha & -1 \end{pmatrix}$$

$$M_p^a = P_p R^{-1} \tilde{M}^a R, \quad P_p = \text{diag}(1, s^{-p}, 1, s^{-p}), \quad R = \text{diag}(1, 1, \phi_1, \phi_1).$$

Если  $\lambda$  является собственным значением, то  $f \in L^2(\Gamma_1)$ , и следовательно, вектор  $X = (\hat{f}_{a;0}, \hat{f}'_{a;0})^T$  должен лежать в линейной оболочке собственных векторов оператора  $M_p^a(\lambda)$ , отвечающих собственным значениям меньше единицы по модулю.

С другой стороны, если  $p \neq 0$ , существует матрица монодромии для  $H_p^z$ , следовательно

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_{z;k+1} \\ \hat{f}'_{z;k+1} \end{pmatrix} = M_{-p}^z(\lambda) \begin{pmatrix} \hat{f}_{z;k} \\ \hat{f}'_{z;k} \end{pmatrix}, \quad \tilde{T}_p = \begin{pmatrix} 2\alpha & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2\alpha & 0 & -1 \\ 2 - 4\alpha^2 & 1 + s^- & 2\alpha & 0 \\ 1 + s^p & 2 - 4\alpha^2 & 0 & 2\alpha \end{pmatrix},$$

$$M_{-p}^z = (M_0(\lambda)^{-1} \otimes (1 + \hat{L}_{-p})^{-1}) R^{-1} \hat{T}_p R, \quad \hat{L}_p = \begin{pmatrix} 0 & s^{-p} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_0 = \begin{pmatrix} \theta & \phi \\ \theta' & \phi' \end{pmatrix}.$$

Обозначим через  $\chi_D(A)$  собственное подпространство оператора  $A$ , соответствующее собственным значениям из области  $D$ . Очевидно, если  $\lambda \notin \sigma_D$ , то  $\lambda \in \text{spec}(H_p)$  если и только если  $\chi_{|z|<1}(M_p^a(\lambda)) \cap \chi_{|z|<1}(M_{-p}^z(\lambda)) \neq \{0\}$ .

### 7.2. Случай $p = 0$

Как было показано выше, матрица монодромии  $M_0^a$  для кресла имеет вид

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_{a;k+1} \\ \hat{f}'_{a;k+1} \end{pmatrix} = M_0^a(\lambda) \begin{pmatrix} \hat{f}_{a;k} \\ \hat{f}'_{a;k} \end{pmatrix}, \quad M_0^a(\lambda) = R^{-1} \tilde{M}^a R, \quad R = \tilde{R} \otimes 1, \quad \tilde{R} = \text{diag}(1, \phi_1).$$

Переходя к образам Фурье  $\hat{g}_{a;k} = \mathcal{F}_2 \hat{f}_{a;k}$ ,  $\hat{g}'_{a;k} = \mathcal{F}_2 \hat{f}'_{a;k}$ ,

$$\mathcal{F}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

мы получаем

$$\hat{M}^a(\lambda) = (1 \otimes \mathcal{F}_2)M_0^a(\lambda)(1 \otimes \mathcal{F}_2)^{-1} = R^{-1}(1 \otimes \mathcal{F}_2)\tilde{M}^a(1 \otimes \mathcal{F}_2)^{-1}R.$$

Обозначим через  $U$  оператор, действующий как  $U(e_j \otimes e_k) = e_k \otimes e_j$ , тогда

$$U \begin{pmatrix} \hat{f}_{a;k} \\ \hat{f}'_{a;k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{f}_{a;0,k} \\ \hat{f}'_{a;0,k} \\ \hat{f}_{a;1,k} \\ \hat{f}'_{a;1,k} \end{pmatrix}, \quad \hat{f}_{a;k} = \begin{pmatrix} \hat{f}_{a;0,k} \\ \hat{f}_{a;1,k} \end{pmatrix}.$$

Далее,

$$U\tilde{M}^aU^{-1} = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\alpha & -1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ 2\alpha^2 - 1 & 2\alpha \end{pmatrix}.$$

Более того,

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}_2 \otimes 1)U\tilde{M}^aU^{-1}(\mathcal{F}_2 \otimes 1)^{-1} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} A+B & A+B \\ A-B & B-A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A+B & 0 \\ 0 & A-B \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (44)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} U\hat{M}_0^a(\lambda)U^{-1} &= U(1 \otimes \mathcal{F}_2)(\tilde{R} \otimes 1)^{-1}\tilde{M}^a(\tilde{R} \otimes 1)(1 \otimes \mathcal{F}_2)^{-1}U^{-1} = \\ &= (1 \otimes \tilde{R}^{-1})(\mathcal{F}_2 \otimes 1)U\tilde{M}^aU^{-1}(\mathcal{F}_2 \otimes 1)(\tilde{R} \otimes 1) = \hat{M}_0^a \oplus \hat{M}_1^a, \end{aligned}$$

где  $\hat{M}_j^a = R^{-1}\tilde{M}_j^aR$ ,  $j = 0, 1$ , и

$$\tilde{M}_0^a = \begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ 2\alpha^2 - \alpha - 1 & 2\alpha - 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{M}_1^a = \begin{pmatrix} -\alpha & -1 \\ 1 - 2\alpha^2 - \alpha & -1 - 2\alpha \end{pmatrix}.$$

Таким образом, мы имеем

$$\begin{pmatrix} \hat{g}_{a;j,k+1} \\ \hat{g}'_{a;j,k+1} \end{pmatrix} = \hat{M}_j^a \begin{pmatrix} \hat{g}_{a;j,k} \\ \hat{g}'_{a;j,k} \end{pmatrix}, \quad j = 0, 1.$$

Теперь рассмотрим решение на части типа «зигзаг». Переходя к образам Фурье, мы получаем

$$\hat{g}_{z;k} = \mathcal{F}_2\hat{f}_{z;k}, \quad \hat{g}'_{z;k} = \mathcal{F}_2\hat{f}'_{z;k}, \quad \hat{g}_{z;k} = \begin{pmatrix} \hat{g}_{z;0,k} \\ \hat{g}_{z;1,k} \end{pmatrix}.$$

Как было показано ранее,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{g}_{z;0,k+1} \\ \hat{g}'_{z;0,k+1} \end{pmatrix} &= M_0^z(\lambda) \begin{pmatrix} \hat{g}_{z;0,k} \\ \hat{g}'_{z;0,k} \end{pmatrix}, \quad M_0^z = M_0^{-1}T_0^z, \\ M_0(\lambda) \begin{pmatrix} \theta_1 & \phi_1 \\ \theta'_1 & \phi'_1 \end{pmatrix}, \quad T_0^z(\lambda) &= \begin{pmatrix} \theta_1 & -\frac{\phi_1}{2} \\ -2\theta'_1 & \phi'_1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Покажем, что матрица монодромии подобна матрице, зависящей лишь от  $\alpha = \theta_1 = \phi'_1$ . В самом деле,

$$\tilde{T}_0^z = \tilde{R}T_0^z\tilde{R}^{-1} = \begin{pmatrix} \theta_1 & -\frac{1}{2} \\ -2\theta'_1\phi_1 & \phi'_1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}\tilde{M}_0^z &= \tilde{M}_0^{-1}\tilde{T}_0^z = \begin{pmatrix} \phi'_1 & -1 \\ -\theta'_1\phi_1 & \theta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 & -\frac{1}{2} \\ -2\theta'_1\phi_1 & \phi'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi'_1\theta_1 + 2\theta'_1\phi_1 & -\frac{3}{2}\phi'_1 \\ -\theta_1\theta'_1\phi_1 - 2\theta_1\theta'_1\phi_1 & \frac{1}{2}\theta_1\phi_1 + \phi'_1\theta_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 3\theta_1\phi'_1 - 2 & -\frac{3}{2}\phi'_1 \\ -3\theta_1(\theta_1\phi'_1 - 1) & \frac{3}{2}\theta'_1\phi'_1 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3\alpha^2 - 2 & -\frac{3}{2} \\ -3\alpha^3 + 3\alpha & \frac{3}{2}\alpha^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (45)\end{aligned}$$

Для оставшейся компоненты мы имеем

$$\phi_1\hat{g}'_{z;1,k}(0) = 2\theta_1\hat{g}_{z;1,k}(0),$$

или

$$\tilde{R} \begin{pmatrix} \hat{g}_{z;1,k} \\ \hat{g}'_{z;1,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \phi_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ 2\theta_1 \end{pmatrix} t = \begin{pmatrix} 1 \\ 2\theta_1 \end{pmatrix} t = \begin{pmatrix} 1 \\ 2\alpha \end{pmatrix} t, \quad t \in \mathbb{R}.$$

В силу условий склейки

$$\hat{g}_{a;j,0} = \hat{g}_{z;j,0}, \quad \hat{g}'_{a;j,0} = \hat{g}'_{z;j,0}, \quad j = 0, 1.$$

Обозначим

$$G_j = \begin{pmatrix} \hat{g}_{a;j,0} \\ \hat{g}'_{z;j,0} \end{pmatrix}, \quad \tilde{G}_j = \tilde{R}G_j.$$

Очевидно, если  $\lambda \notin \sigma_D$ , то  $\lambda \in \text{spec}(H_0)$  если и только если существует нетривиальная функция  $G = (G_0, G_1)$  такая, что

$$\tilde{G}_0 \in \chi_{|z|<1}(\tilde{M}_0^z) \cap \chi_{|z|<1}(\tilde{M}_0^z), \quad (46)$$

$$\tilde{G}_1 \in \chi_{|z|<1}(\tilde{M}_1^a) \cap \text{span} \begin{pmatrix} 1 \\ 2\alpha \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Так как условия на  $G_0$  и  $G_1$  независимы, мы имеем два семейства собственных значений.

Рассмотрим сначала компоненту  $\tilde{G}_1 = (1, 2\alpha)^T$ . Так как матрица  $\tilde{M}_1^a$  является симплектической, подпространство  $\chi_{|z|<1}(\tilde{M}_1^a)$  либо одномерное, либо вырожденное. Если подпространство невырожденное, то  $\tilde{G}_1$  является собственным вектором. Поэтому

$$\tilde{M}_1^a \tilde{G}_1 = \begin{pmatrix} -\alpha & -1 \\ 1 - 2\alpha^2 - \alpha & -1 - 2\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3\alpha \\ -6\alpha^2 - 3\alpha + 1 \end{pmatrix} = \nu \begin{pmatrix} 1 \\ 2\alpha \end{pmatrix},$$

следовательно, соответствующее собственное значение матрицы  $\tilde{M}_1^a$  есть  $\nu = -3\alpha$ , и  $\tilde{G}_1$  является собственным вектором если и только если  $-6\alpha^2 - 3\alpha + 1 = \nu 2\alpha$ . Следовательно,  $\alpha = \frac{1}{3}$ , а значит  $\nu = 1$ , что влечет вырожденность пространства  $\chi_{|z|<1}(\tilde{M}_1^a)$ . Мы заключаем, что это семейство собственных значений пусто.

Теперь рассмотрим компоненту  $\tilde{G}_1$ . Предположим, что найдется нетривиальная  $\tilde{G}_1$ , удовлетворяющая (46). Так как  $\tilde{M}_0^a$  и  $\tilde{M}_0^z$  симплектичны, их собственные значения просты. Следовательно,  $\chi_{|z|<1}(\tilde{M}_0^a)$  и  $\chi_{|z|<1}(\tilde{M}_0^z)$  имеют нетривиальное пересечение, если и только если эти пространства совпадают. Следует отметить, что матрица  $2 \times 2$  симплектична, если и только если ее определитель равен единице, т.е. любая замена базиса сохраняет симплектичность. В собственном базисе матрицы  $\tilde{M}_0^a$ , матрицы  $\tilde{M}_0^a$  и  $\tilde{M}_0^z$  имеют вид

$$L^{-1}\tilde{M}_0^a L = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda} \end{pmatrix}, \quad L^{-1}\tilde{M}_0^z L = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ \nu & \frac{1}{\mu} \end{pmatrix},$$

для некоторых  $\nu, \mu, \lambda$ . Тогда их коммутатор получается так

$$L^{-1}[\tilde{M}_0^a|\tilde{M}_0^z]L = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ \nu & \frac{1}{\mu} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ \nu & \frac{1}{\mu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \nu\lambda \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Отметим, что  $\det[\tilde{M}_0^a|\tilde{M}_0^z] = \text{tr}[\tilde{M}_0^a|\tilde{M}_0^z] = 0$ . Более того, эти условия достаточны, чтобы удовлетворить (46) для некоторого невырожденного  $G_0$ .

Теперь вычислим коммутатор.

$$\begin{aligned}\tilde{M}_0^a \tilde{M}_0^z &= \begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ 2\alpha^2 - \alpha - 1 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3\alpha^2 - 2 & -\frac{3}{2}\alpha \\ -3\alpha^3 + 3\alpha & \frac{3}{2}\alpha^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & -\frac{1}{2} \\ -\alpha^2 - \alpha + 2 & \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \\ \tilde{M}_0^z \tilde{M}_0^a &= \begin{pmatrix} 3\alpha^2 - 2 & -\frac{3}{2}\alpha \\ -3\alpha^3 + 3\alpha & \frac{3}{2}\alpha^2 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ 2\alpha^2 - \alpha - 1 & \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{3}{2}\alpha^2 - \frac{\alpha}{2} & \frac{3}{2}\alpha - 2 \\ -\frac{3}{2}\alpha^3 + \frac{1}{2}\alpha^2 + \frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2} & -\frac{3}{2}\alpha^2 + 2\alpha + \frac{1}{2} \end{pmatrix},\end{aligned}$$

следовательно,

$$[\tilde{M}_0^a | \tilde{M}_0^z] = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} \alpha - \alpha^2 & 1 - \alpha \\ \alpha^3 - \alpha^2 - \alpha + 1 & \alpha^2 - \alpha \end{pmatrix}.$$

Очевидно,  $\text{tr} [\tilde{M}_0^a | \tilde{M}_0^z] = 0$  для всех  $\alpha$ . Далее,

$$\det[\tilde{M}_0^a | \tilde{M}_0^z] = -(\alpha - \alpha)^2 - (1 - \alpha)(\alpha^3 - \alpha^2 - \alpha + 1) = -\alpha^2(1 - \alpha)^2 - (1 - \alpha)^2(1 - \alpha^2) = -(1 - \alpha)^2.$$

Тогда  $\det[\tilde{M}_0^a | \tilde{M}_0^z] = 0$ , если и только если  $\alpha = 1$ ; Более того, для  $\alpha = 1$ , мы имеем  $[\tilde{M}_0^a | \tilde{M}_0^z] = 0$ . Однако, если  $\alpha = 1$ , матрица  $\tilde{M}_0^a$  имеет собственные значения

$$\lambda = \frac{-(3\alpha - 1) \pm \sqrt{(3\alpha - 1)^2 - 4}}{2} = -1,$$

Следовательно, условия (46) выполняются лишь для тривиальной  $G_0$ . Подытоживая,  $H_0$  не имеет собственных значений, не входящих в спектр Дирихле.

Работа поддержана ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы» (контракты Р689 НК-526Р, 14.740.11.0879, 16,740,11,0030), грантом 11-08-00267 РФФИ.

## Литература

- [1] A. Badanin, J. Brüning, E. Korotyaev, I. Lobanov. Schrödinger operators on armchair nanotubes. I. arXiv:0707.3909
- [2] Chuanhong Jin, Kazu Suenaga, Sumio Iijima Plumbing carbon nanotubes // Nature Nanotechnology 3, 17 - 21. - 2008. Published online: 9 December 2007 doi:10.1038/nnano.2007.406
- [3] E. Korotyaev. Lattice Dislocations in a 1-Dimensional Model // Commun. Math. Phys. - 2000. - 213. - P. 471-489.
- [4] E. Korotyaev. Schrödinger operator with a junction of two 1-dimensional periodic potentials // Asymptotic Analysis. - 2000. - 45. - P. 73-97.
- [5] E. Korotyaev, I. Lobanov. Schrödinger Operators on Zigzag Nanotubes // Journal Annales Henri Poincare. - 2007. - 8 (6). - P. 1151-1176.
- [6] A. Rochefort, P. Avouris. Quantum Size Effects in Carbon Nanotube Intramolecular Junctions // Nano Letters. - 2002. - 2 (3). - pp 253-256 DOI: 10.1021/nl015705t
- [7] H. Santos, A. Ayuela, W. Jaskolski, M. Pelc, L. Chico. Interface States in Carbon Nanotube Junctions: Rolling up graphene // Phys. Rev. B. - 2009. - 80. - 035436.
- [8] Wang, R. N., Zheng, X. H., Song, L. L. and Zeng, Z., Ab initio study on the electronic transport properties of carbon nanotube intramolecular junctions // Physica status solidi (a). 2011. - 208: 2803-2808. doi: 10.1002/pssa.201127314
- [9] Wei, D. and Liu, Y., The Intramolecular Junctions of Carbon Nanotubes // Advanced Materials. 2008. - 20: 2815-2841. doi: 10.1002/adma.200800589
- [10] Yagang Yao, Qingwen Li, Jin Zhang, Ran Liu, Liying Jiao, Yuntian T. Zhu, Zhongfan Liu. Temperature-mediated growth of single-walled carbon-nanotube intramolecular junctions // Nature Materials. - 2007. - 6. - P. 283-286. Published online: 18 March 2007 doi:10.1038/nmat1865