НАНОСИСТЕМЫ: ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА, 2012, 3 (3), С. 23–30

УДК 517.938

СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ЦЕПОЧЕК СЛАБО СВЯЗАННЫХ ШАРООБРАЗНЫХ РЕЗОНАТОРОВ

А. С. Аникевич

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

shadowpoos@gmail.com

В данной статье рассматривается спектральная задача для двух цепочек слабо связанных шарообразных резонаторов: прямой и с изломом. На основе теории самосопряженных расширений симметрических операторов и при использовании теории Блоха и подхода матриц монодромии выводятся уравнения на спектр для обеих цепочек. В статье показано, что система типа прямой цепочки слабо связанных шарообразных резонаторов обладает непрерывным спектром энергий с зонной структурой. А для цепочки с изломом доказывается теорема существования точечного спектра.

Ключевые слова: спектр, теория расширений, самосопряженность, матрица монодромии, теорема существования.

1. Введение

В начале прошлого столетия ученые обратились к исследованию некоторого класса решаемых моделей квантовой механики, задающихся оператором Шрёдингера с потенциалом, сосредоточенным на дискретном множестве точек (см. [1]). Несколько лет назад вышла статья [2], в которой рассматривалась одномерная спектральная задача для квантового графа, представляющего собой цепочку колец, связанных дельта-соединением, с изгибом. В данной статье мы рассмотрим спектральную задачу для бесконечной цепочки в трехмерном пространстве, элементарная ячейка которой представляет собой шар единичного радиуса. В точках соединения резонаторов будем предполагать наличие дельтаобразных потенциалов. Основной целью данной работы является нахождение спектра бесконечной прямой цепочки шарообразных резонаторов и цепочки указанного вида с изломом.

2. Спектральная задача для прямой цепочки

Рассмотрим прямую бесконечную цепочку, состоящую из соединенных между собой точечным проколом шаров единичного радиуса. Шар указанного радиуса будем считать элементарной ячейкой цепи, а в точке соединения резонаторов будем предполагать наличие дельтаобразного потенциала интенсивности α. Будем исследовать стационарное состояние бесспиновой нерелятивистской частицы, волновая функция $\psi(x)$ которого удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера:

$$\hat{H}(x)\,\psi(x) = \lambda\psi(x)\,.$$

Для более удобного рассмотрения задачи выберем систему единиц измерения такой, чтобы $\hbar = 2m = 1$. Будем считать, что внутри каждого шара внешние поля отсутствуют.

На границе шара предполагаем выполнение условия Неймана:

$$\left.\frac{\partial \psi}{\partial n}\right|_{\partial\Omega} = 0.$$

Тогда, оператор Гамильтона $\hat{H}$ частицы представим в следующем виде:

$$\hat{H} = -\Delta = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right).$$

Решение указанной задачи будем проводить с помощью теории самосопряженных расширений симметрических операторов (см., [3]). Элементарные ячейки цепи соединены с помощью точечного прокола [4], [5], [6]. Для упрощения и определенности рассмотрения будем полагать, что все проколы находятся на одной из координатных осей — оси OX, — и имеют координаты $\mathbf{x}_j = (x_j, 0, 0)$. Чтобы описать самосопряженное расширение оператора можно проанализировать сужение оператора: сузим оператор $-\Delta$ на множество всех функций из $D(-\Delta)$, обращающихся в нуль в близи точки $\mathbf{x}_j$. Получили симметрический оператор $-\Delta_0$, для которого дефектными элементами (см., [7]) являются функции Грина $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda)$.

В данной задаче функцию Грина будем записывать в сферических координатах с помощью разложения в ряд по собственным функциям, тогда она будет иметь следующий вид:

$$G(r, \theta, \varphi, r_j, \theta_j, \varphi_j, \lambda) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \frac{\Psi_{klm}(r, \theta, \varphi)\, \overline{\Psi_{klm}(r_j, \theta_j, \varphi_j)}}{\lambda_{lk} - \lambda},$$

где $\lambda_{lk} = x_{lk}^2$ — собственные числа, $\Psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = N_{lk} j_l(x_{lk} r)\, Y_l^m(\theta, \varphi)$ — собственные функции задачи Неймана для оператора Лапласа в шаре, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ — сферические гармоники, $j_l(x)$ — сферическая функция Бесселя, x_{lk} — k-й корень уравнения $j_l'(x) = 0$, N_{lk} — нормировочный коэффициент.

Как было сказано выше, сужение исходного оператора — оператор $-\Delta_0$, — является симметрическим, но не самосопряженным оператором. Построим его расширение — оператор $-\Delta_0^*$.

Пусть $U \in D(-\Delta_0^*)$ и U представима в следующем виде:

$$U = U_0 + \frac{a_u}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|} + b_u,$$

где $U_0 \in D(-\Delta_0^*)$, $U_0(\mathbf{x}_j) = 0$; а a_u, b_u — некоторые коэффициенты. Здесь и далее будем использовать следующие обозначения: a_j^+, a_j^- — коэффициенты, относящиеся к точкам прокола в j-м шаре, как указано на рис. 1 (коэффициенты b_j^+, b_j^- обозначаются по аналогичным соображениям):

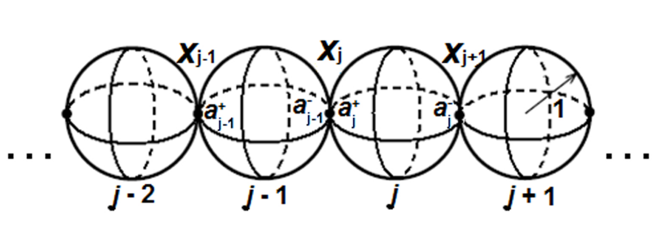

Рис. 1. Схема модели прямой цепочки

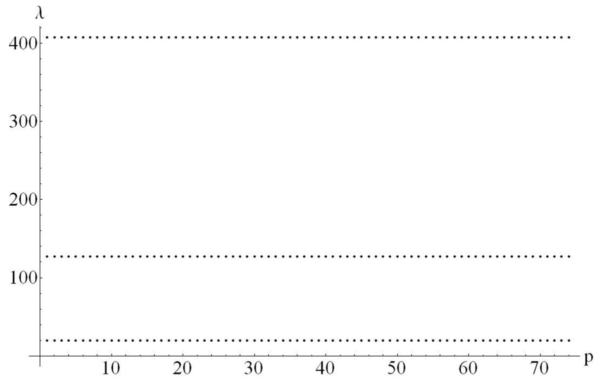

Рис. 2. График зависимости $\lambda(p)$. Зонная структура спектра при $\alpha = 3$

С учетом введенных обозначений требование самосопряженности оператора обеспечивается, например, при следующем выборе соотношений для коэффициентов:

$$\begin{cases} a_j^+ = -a_{j-1}^-, \\ b_j^+ = b_{j-1}^-. \end{cases}$$

Мы требуем в точках соединения резонаторов наличия дельтаобразного потенциала, что накладывает несколько другие условия:

$$\begin{cases} a_j^+ = -a_{j-1}^-, \\ b_j^+ - b_{j-1}^- = \alpha a_{j-1}^-. \end{cases} \tag{1}$$

Так как рассматриваемая нами модель 1D-периодична, для вычисления спектра оператора мы будем пользоваться теорией Блоха—Флоке. Волновая функция в j-м шаре имеет вид:

$$\psi_j(\mathbf{x}) = a_j^+ G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) + a_j^- G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{j+1}, \lambda).$$

По теореме Блоха $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{T}) = e^{ipT}\psi(\mathbf{x})$, где p — так называемый квазиимпульс $\left(0 \leqslant p \leqslant \frac{2\pi}{T}\right)$, а T — период системы. Отсюда можно получить следующие соотношения для коэффициентов $a_j^{\pm}$:

$$a_j^{\pm} = e^{ipT} a_{j-1}^{\pm}, \tag{2}$$

$$a_j^{\pm} = e^{-ipT} a_{j+1}^{\pm}, \tag{3}$$

$$a_j^{\pm} = e^{ijpT} a_0^{\pm}.$$

Коэффициенты b_j^+, b_{j-1}^- представимы в следующем виде:

$$b_j^+ = a_j^+ \lim_{\mathbf{x}\to\mathbf{x}_j} \left(G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)\right) + a_j^- G(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{x}_j, \lambda), \tag{4}$$

$$b_{j-1}^- = a_{j-1}^- \lim_{\mathbf{x}\to\mathbf{x}_j} \left(G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)\right) + a_{j-1}^+ G(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j, \lambda). \tag{5}$$

Подставив выражения (2), (3), (4), (5), а также первое уравнение системы (1) во второе уравнение этой системы, получаем основное уравнение на спектр для прямой бесконечной цепи слабо связанных шарообразных резонаторов:

$$\alpha + 2 \lim_{\mathbf{x}\to\mathbf{x}_j} \left(G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)\right) - 2\cos(p\,T)\, G(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{x}_j, \lambda) = 0. \tag{6}$$

Численно решая уравнение (6) при различных значениях квазиимпульса p[1], мы приходим к результатам, отраженным на графике (см. рис. 2).

Следует отметить, что линии, которые мы видим на рис. 2, не являются прямыми линиями. Подобное впечатление возникает из-за выбора масштаба. Такой масштаб графика был выбран для того, чтобы показать зонную структуру спектра: как видно из этого графика, мы имеем спектральные зоны, разделенные довольно большими лакунами. Что же касается «прямых» линий, то на самом деле они имеют более сложный профиль, как изображено на рис. 3, 4, 5.

Таким образом, для случая прямой бесконечной цепочки слабо связанных шарообразных резонаторов мы имеем непрерывный спектр с зонной структурой.

3. Спектральная задача для цепочки с изломом

В данном разделе будем рассматривать систему, описанную выше, предполагая наличие излома цепочки в нулевой элементарной ячейке под углом β, как показано на рис. 6.

[1]При расчете всех графиков в данном разделе не рассматриваются значения квазиимпульса p, равные $0, \pi/2, \pi$

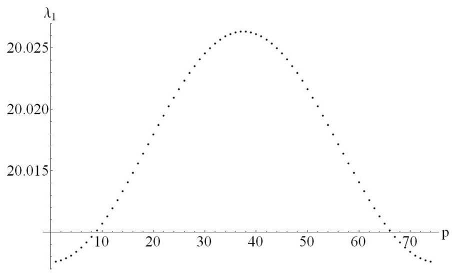

Рис. 3. График зависимости $\lambda_1(p)$. Первая зона при $\alpha = 3$

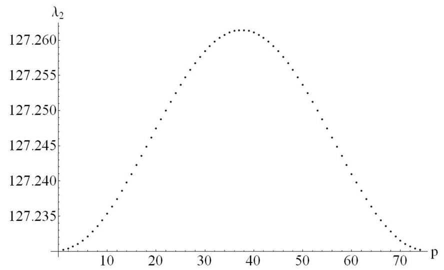

Рис. 4. График зависимости $\lambda_2(p)$. Вторая зона при $\alpha = 3$

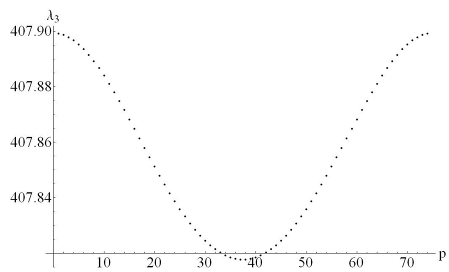

Рис. 5. График зависимости $\lambda_3(p)$. Третья зона при $\alpha = 3$

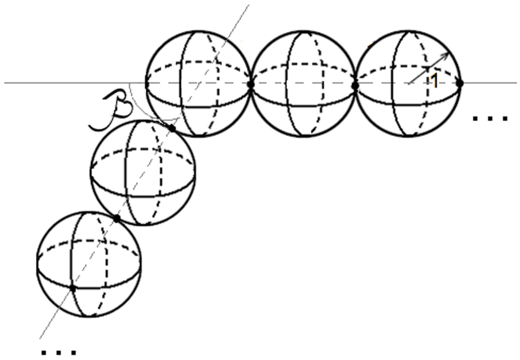

Рис. 6. Схема модели цепочки с изломом

Получим связь для коэффициентов $a_j^\pm$, $a_{j-1}^\pm$. Подставив выражения (4), (5) и первое уравнение системы (1) во второе уравнение этой системы, приходим к матричной связи между коэффициентами в соседних ячейках:

$$\begin{pmatrix} a_j^+ \\ a_j^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \dfrac{G(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j, \lambda)}{G(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{x}_j, \lambda)} & \dfrac{\alpha + 2\left(G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)\right)\big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_j}}{G(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{x}_j, \lambda)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{j-1}^+ \\ a_{j-1}^- \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} a_{j-1}^+ \\ a_{j-1}^- \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Матрицу $\mathbf{M}$, указанную в выражении (7), обычно называют матрицей монодромии или трансферной матрицей (см., [8]). Таким образом, коэффициенты j-й элементарной ячейки могут быть высчитаны через значение коэффициентов первой ячейки (где $j \geqslant 2$) с помощью матрицы $\mathbf{M}$.

Так как известен явный вид матрицы $\mathbf{M}$, то можно найти ее собственные числа $\mu_{1,2}$ и собственные векторы $\nu_{1,2}$. Причем, собственные векторы с точностью до константы имеют следующий вид:

$$\nu_{1,2} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\mu_{1,2} \end{pmatrix}.$$

Согласно [9], локальные возмущения сохраняют непрерывный спектр. В нашей задаче излом цепи под углом β представляет собой локальное возмущение, поэтому особый интерес привлекает нахождение дискретного спектра для данной системы. Следовательно, для решения этой задачи необходимо рассматривать волновые функции, убывающие на бесконечности. Выполнение данного требования возможно при рассмотрении собственных векторов, соответствующих собственным числам матрицы $\mathbf{M}$, по модулю меньших единицы. Далее будем считать, что вектор $\begin{pmatrix} a_j^+ & a_j^- \end{pmatrix}^T$ (для любого j) с точностью до множителя совпадает с собственным вектором ν матрицы $\mathbf{M}$, собственное число которого по модулю меньше единицы, что накладывает условие линейной зависимости на вектора $\begin{pmatrix} a_{-1}^+ & a_{-1}^- \end{pmatrix}^T$ и $\begin{pmatrix} a_1^+ & a_1^- \end{pmatrix}^T$.

Воспользовавшись условиями (1) для соединения элементарных ячеек под номерами –1,0,1, а также, предполагая один из векторов (пусть для определенности вектор $\begin{pmatrix} a_{-1}^+ & a_{-1}^- \end{pmatrix}^T$) совпадающим с собственным вектором, описанным выше, приходим к следующему выражению:

$$\begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\dfrac{X^2 - XS - 2Y^3}{2Y^2 Z} \\ \dfrac{2XY^3 - \left(X^2 - Z^2\right)(X - S)}{2Y^3 Z} \end{pmatrix}.$$

Здесь были использованы следующие обозначения:

$$g = G(\mathbf{x}_1) = \lim_{\mathbf{x}\to\mathbf{x}_1} \left(G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \lambda) - G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \lambda_0)\right),$$
$$X = \alpha + 2g,$$
$$Y = G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \lambda),$$
$$Z = G(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \lambda),$$
$$S = \sqrt{X^2 - 4Y^2},$$

Тогда, в введенных нами обозначенях, условие на модуль собственного числа матрицы **M** примет вид:

$$\frac{X}{2Y} > 1. \tag{8}$$

Удовлетворяя условию линейной зависимости:

$$\begin{vmatrix} a_1^+ & 1 \\ a_1^- & -\left.\mu\right|_{j=-1} \end{vmatrix} = 0,$$

приходим к основному уравнению для цепочки с изломом:

$$\begin{gathered} \alpha^3 + 6\alpha^2 g + 12\alpha g^2 + 8g^3 - X^2 \left(XY - S(1 - Y)\right) + \\ + S\left(Y^2 - Z^2\right) - 2XY^2\left(1 - Y^2\right) = 0. \end{gathered} \tag{9}$$

Параметр β входит в данное уравнение как параметр функции Грина $G(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \lambda)$, так как точка $\mathbf{x}_0$ в сферических координатах имеет следующее представление:

$$\mathbf{x}_0 = (r_0, \theta_0, \varphi_0) = \left(1, \frac{\pi}{2} + \beta, \pi\right).$$

Проанализировав вид функции, стоящей в левой части уравнения (9) можно сделать некоторые выводы по поводу решения данного уравнения и сформулировать следующую теорему:

Теорема. *Множество значений дискретного спектра для системы, представляющей собой бесконечную цепочку шарообразных резонаторов с изломом, не пусто (т.е. существуют такие значения $\alpha > 0$, что уравнение (9) имеет решение при условии (8)).*

Доказательство. Действительно, функция, описанная в левой части уравнения (9), имеет множество вертикальных асимптот и стремится к любым двум соседним из них либо как тангенс (к $-\infty$ справа от левой асимптоты и к $+\infty$ слева от правой асимптоты), либо к бесконечности одного знака у обеих асимптот (см. рис. 7):

В первом случае (когда функция ведет себя как тангенс) мы обязательно пересечем ось $0x$, то есть решение существует. Во втором случае (при стремлении к бесконечностям одного знака) это можно сделать за счет выбора α. Таким образом, решение уравнения (9) существует.

Теперь обратимся к условию (8). Его также можно представить в следующем виде:

$$X - 2Y > 0. \tag{10}$$

Функция, указанная в левой части выражения (10), также имеет вертикальные асимптоты (и они совпадают с асимптотами для левой части уравнения (9), но у последней их больше) и стремится к ним как тангенс (см. рис. 8) .

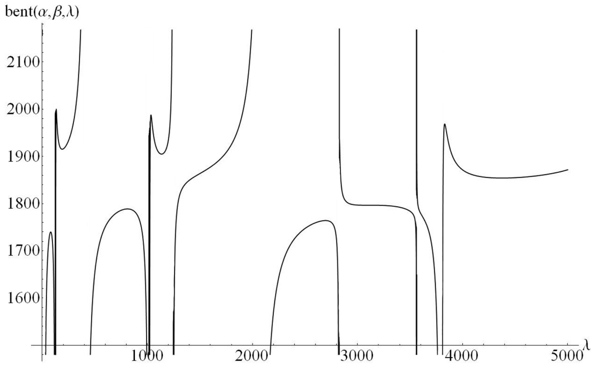

Рис. 7. График lhs уравнения (9) при $\alpha = 10$, $\beta = \pi/2$

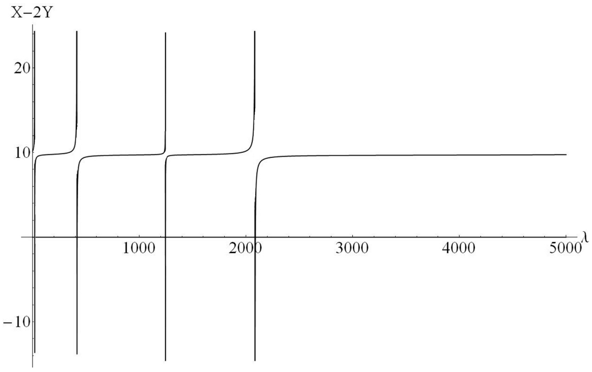

Рис. 8. График lhs неравенства (10) при $\alpha = 10$, $\beta = \pi/2$

Следует также отметить, что точки перегиба этих тангенсообразных кривых находятся на уровне, близком к значению α, а значит, за счет выбора величины α можно добиться выполнения условия (10) при большом диапазоне значений λ (за исключением точек, расположенных близко к линиям асимптот). Таким образом, при определенном значении α найдется решение уравнения (9), удовлетворяющее условию (8). ■

Промоделировав численно поведение системы при изменении угла излома β, можно прийти, например, к следующим результатам (см. рис. 9).

4. Заключение

Итак, в данной работе описывается решение спектральной задачи на основе теории самосопряженных расширений симметрических операторов для бесконечной периодической цепочки шарообразных резонаторов и для бесконечной цепочки с изломом.

Для невозмущенной цепочки резонаторов с помощью теории Блоха–Флоке было выведено основное уравнение на спектр. А также показано, что такая система обладает непрерывным спектром энергий с зонной структурой.

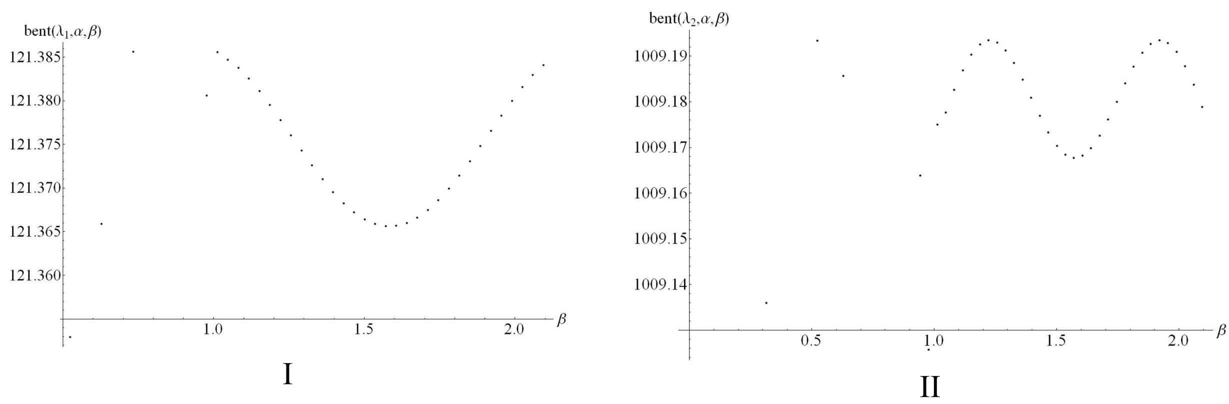

Рис. 9. График зависимости величины λ от угла излома цепи β при $\alpha = 3$ (в случае I величине λ соответствуетзначение корня, лежащего вблизи 121, а в случае II — вблизи 1009).

Для возмущенной цепочки блягодаря квазиодномерности задачи (мы предполагали соединение резонаторов через точку) был впервые (для трехмерной системы) применен подход метода матриц монодромии и на его основании получено основное уравнение на спектр. Также была сформулировани и доказана теорема существования дискретного спектра у системы описанного вида.

Работа поддержана в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (ГК No. P689 NK-526P, 14.740.11.0879, и 16.740.11.0030), грантом РФФИ 11-08-00267 и ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы» (ГК No. 07.514.11.4146).

Литература

[1] Альбеверио С., Гестези Ф., Хёэг-Крон Р., Хольден Х. Решаемые модели в квантовой механике, М.: Мир, 1991. — 568 с.
[2] Duclos P., Exner P., Turek O. On the spectrum of a bent chain graph. — BS.: IOP Publishing, 2008. — 18 p.
[3] Павлов Б. С. Теория расширений и явнорешаемые модели // Успехи математических наук. — 1987. — Т. 6 — № 258. — С. 99-131.
[4] Попов И. Ю. Теория расширений и локализация резонансов для областей ловушечного типа // Матем. сб. — 1990. — Т. 181. — № 10. — С. 1366–1390.
[5] Попов И. Ю. Резонатор Гельмгольца и теория расширений операторов в пространстве с индефинитной метрикой // Матем. сб. — 1992. — Т. 183. — № 3. — С. 3–37.
[6] Popov I.Yu. The resonator with narrow slit and the model based on the operator extensions theory // J. Math. Phys. — 1992. — V. 33. — No. 11. — P. 3794-3801.
[7] Ахиезер Н. И., Глазман И. М. Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. — М.: Наука, 1966. — 543 с.
[8] Bagraev N., Martin G., Pavlov B.S., Yafyasov A. Landau-Zener effect for a quasi-2D periodic sandwich // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathyematics — 2011. — V. 2. — No. 4. — P. 32-50.
[9] Бирман М. Ш., Соломяк М. З. Спектральная теория самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве / Учеб. пособие — Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980. — 264 с.