

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» (Новосибирский государственный
университет, НГУ)

Механико-математический факультет

Кафедра теории функций

Направление подготовки «Математика», магистратура

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРА

Фадеева Степана Александровича

**Задача рассеяния для уравнения Шрёдингера на метрических
графах**

«К защите допущен»

Заведующий кафедрой,

д.ф.-м.н., проф.

Медных А.Д. / _____

(Фамилия, И.О.) / (подпись, МП)

«_____» _____ 2020 г.

«Научный руководитель»

к.ф.-м.н.

с.н.с. ИМ им. Соболева

Дедок В.А. / _____

(Фамилия, И.О.) / (подпись, МП)

«_____» _____ 2020 г.

Дата защиты: «_____» _____ 2020 г.

Новосибирск, 2020

РЕФЕРАТ

Название работы: Задача рассеяния для уравнения Шрёдингера на метрических графах.

Количество страниц: ??.

Количество используемых источников: ??.

Ключевые слова: задача рассеяния, уравнение Шрёдингера, метрические графы, компактные графы, законы Кирхгофа, квантовые графы, спектральная хирургия.

Объект исследования — рассеяние на метрических графах, прямые и обратные задачи. Цели дипломной работы — исследование изменений данных рассеяния при топологических преобразованиях квантовых графов, а также изучение зависимости данных рассеяния от рассеивающих потенциалов. Исследование основано на технике спектральной хирургии квантовых графов, последовательном приближении рассеивающего потенциала ступенчатыми функциями, отслеживании изменения данных рассеяния при подобных приближениях. Область применения и рекомендации — математическое моделирование мезоскопических систем, нанoeлектроника, теория квантового хаоса, квантовые вычисления. В результате исследования были обобщены теоремы о спектральной хирургии квантовых графов, а также изучена сходимость данных рассеяния при константных возмущениях потенциала.

Содержание

ВВЕДЕНИЕ	4
1 ОДНОМЕРНАЯ ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ	6
1.1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ	6
ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ	6
1.2 Константный потенциал	8
2 Задача Штурма-Лиувилля на компактных графах	9
3 Задача рассеяния на некомпактных графах	11
3.1 Задача рассеяния на звёздных графах	11
3.2 Петля с n полубесконечными рёбрами	12
3.3 Кольцо с n полубесконечными рёбрами	15
4 Спектральная хирургия квантовых графов	17
ЛИТЕРАТУРА	23

ВВЕДЕНИЕ

Задача распространения волн в ветвящихся структурах и сетях играет важную роль во многих областях современной физики [1]. Для моделирования подобных явлений часто используются квантовые графы: компактные графы с добавленными бесконечными дугами. На каждой дуге определено одномерное стационарное уравнение Шрёдингера, в качестве граничных условий в узлах используются законы Кирхгофа для квантовых графов [2]. Важной особенностью рассматриваемых конструкций является распространение волн вдоль рёбер, сопровождающееся рассеянием (отражением) волны в узлах графа. Бесконечно накапливаясь, отражённые волны могут оказать существенное влияние на решение задачи рассеяния.

Впервые квантовые графы одномерных нитевидных структур, соединённых в вершинах, появились в работе Н. Kuhn [3] и использовались для моделирования свободных электронов органических молекул. В данной работе органическая молекула была представлена набором атомов, расположенных в определённых координатах, соединённых связями, вдоль которых электроны подчиняются одномерному стационарному уравнению Шрёдингера с подходящим потенциалом.

Позднее аналогичный подход был применён в задачах моделирования сверхпроводников и искусственных материалов [4], теории мезоскопических систем [5], теории квантового хаоса [6].

В настоящее время ведутся исследования в области спектральных оценок квантовых графов [7], в том числе при использовании обобщённых граничных условий (delta couplings) [8]. Кроме того, рассматриваются времязависимые модели в электромагнитных полях [9, 10].

Нас интересуют некомпактные графы, содержащие полубесконечные дуги. Такая гибкая конструкция позволяет воспроизводить черты многомерных объектов, будучи одномерной [11].

В силу топологической сложности графов, в общем случае поиск решения задачи рассеяния является достаточно сложной проблемой. Методы решения, применяемые к одномерным и многомерным задачам рассеяния, не могут быть применимы к данной задаче. Поэтому для решения задачи рассеяния на топологически сложном графе предлагается

найти решение на топологически примитивных графах, а затем склеить друг с другом примитивы согласно некоторым правилам преобразования данных рассеяния. Этот метод называется техникой спектральной хирургии квантовых графов и описан в [12].

Данная работа состоит из двух частей.

Первая часть посвящена обобщению теорем спектральной хирургии. Получен результат о склейке двух графов, содержащих неизвестную компактную часть, известные данные рассеяния. В дальнейшем планируется обобщить полученные результаты для получения теоремы о склейке по произвольному количеству дуг полубесконечной длины.

Вторая часть посвящена исследованию зависимости данных рассеяния на некомпактном графе от рассеивающих потенциалов. В силу сложности задачи рассеяния, были рассмотрены некоторые частные случаи графов и потенциалов на внутренних дугах. Для данных частных случаев графов (петля и кольцо с полубесконечными дугами) были решены прямые задачи по определению данных рассеяния для различных потенциалов. Были исследованы свойства данных рассеяния на таких графах со ступенчатыми потенциалами на внутренних ребрах, численно изучены эффекты возникновения новых волн при трансформации потенциала. В дальнейшем планируется применить полученные результаты для построения вычислительно эффективного метода решения обратной задачи рассеяния.

1 ОДНОМЕРНАЯ ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ

1.1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

В теории рассеяния на квантовых графах основным объектом исследования является одномерное стационарное уравнение Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + v\psi = E\psi,$$

Заменив $2E/\hbar^2 = k^2$ и $2mv/\hbar^2 = u$, получим уравнение в безразмерной форме

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + u\psi = k^2\psi. \quad (1)$$

Определение 1.1. *Оператор Шрёдингера* — это дифференциальный оператор $-\frac{d^2}{dx^2} + u$.

Определение 1.2. *Потенциал уравнения (потенциал оператора Шрёдингера)* — это коэффициент u .

Определение 1.3. *Спектральный параметр* — это константа k .

Отметим, что при $k = 0$, получаем описание движения частицы в отсутствие внешних полей

$$\psi = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}, \quad \text{если } u \equiv 0.$$

Также будем называть волновой функцией решение уравнения Шрёдингера.

Волновая функция обладает следующими свойствами [13, 14]:

- $\psi(x)$ — комплекснозначная функция
- $\psi(x)$ — конечная функция (интегрируема с квадратом)
- $\psi(x)$ — однозначная функция координат и времени
- $\psi(x)$ — непрерывная функция

При этом физический смысл имеет только квадрат модуля волновой функции: $|\psi(x)|^2 = \psi(x) \psi(x)^*$ — плотность вероятности нахождения частицы в некоторой области.

В теории рассеяния на квантовых графах часто налагают дополнительные ограничения на потенциалы: они считаются измеримыми функциями с конечными первыми моментами

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 + |x|)|u(x)|dx < \infty.$$

Это условие означает, что потенциал u достаточно быстро (быстрее чем $x^{-\delta}$, $\delta \geq 2$) убывает при $|x| \rightarrow \pm\infty$.

Переходя к асимптотике, получим:

$$-\psi'' = k^2\psi, \quad |x| \gg 1,$$

откуда имеем

$$\psi = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} + o(1), \quad x \rightarrow \pm\infty.$$

Без ограничений общности, будем считать, что источник волны находится в $+\infty$. Это соответствует следующему начальному условию на $-\infty$:

$$\psi = e^{-ikx} + o(1), \quad x \rightarrow -\infty, \quad (2)$$

Тогда асимптотический вид волновой функции на $+\infty$ имеет вид:

$$\psi = a(k)e^{-ikx} + b(k)e^{ikx} + o(1), \quad x \rightarrow +\infty. \quad (3)$$

Определение 1.4. Коэффициент прохождения — это коэффициент $a = a(k)$, соответствует частице, движущейся влево.

Определение 1.5. Коэффициент отражения — это коэффициент $b = b(k)$, соответствует частице, движущейся вправо.

Определение 1.6. Данные рассеяния — это набор всех коэффициентов отражения и прохождения.

Определение 1.7. Прямая задача рассеяния — вычисление данных рассеяния по заданному потенциалу согласно формулам (1), (2), (3).

Определение 1.8. *Обратная задача рассеяния* — вычисление потенциала по заданным данным рассеяния согласно формулам (1), (2), (3).

В теории квантовых графов данные рассеяния обычно представляются в виде матрицы рассеяния. Так, для одномерного стационарного уравнения Шрёдингера она определяется асимптотиками:

TODO: похоже, что тут надо поменять $s_{12} \leftrightarrow s_{11}$, $s_{21} \leftrightarrow s_{22}$.

$$\begin{aligned}\psi_1(x, k) &= e^{ikx} + s_{12}(k)e^{-ikx} + o(1), & x \rightarrow -\infty, \\ \psi_1(x, k) &= s_{11}(k)e^{ikx} + o(1), & x \rightarrow +\infty, \\ \psi_2(x, k) &= e^{-ikx} + s_{21}(k)e^{ikx} + o(1), & x \rightarrow +\infty, \\ \psi_2(x, k) &= s_{22}(k)e^{-ikx} + o(1), & x \rightarrow -\infty.\end{aligned}$$

Определение 1.9. *S-матрица (матрица рассеяния)* — это матрица

$$S(k) = \begin{pmatrix} s_{11}(k) & s_{12}(k) \\ s_{21}(k) & s_{22}(k) \end{pmatrix} \quad (4)$$

Л. Д. Фаддеевым доказано [15], что существуют решения с заданными асимптотиками, а также S -матрица унитарна и удовлетворяет условию симметрии $s_{11}(k) = s_{22}(k)$.

1.2 Константный потенциал

Предположим, что в уравнении (1) потенциал

$$u = u(x) \equiv \tilde{u} = \text{const} \in \mathbb{C},$$

тогда имеем линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами. Его характеристическое уравнение имеет вид

$$-\lambda^2 + \tilde{u} = k^2$$

и корни

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{\tilde{u} - k^2}$$

Тогда общее решение имеет вид

$$\psi(x) = C_1 e^{\sqrt{\tilde{u}-k^2}x} + C_2 e^{-\sqrt{\tilde{u}-k^2}x}$$

В частности, если $\tilde{u} \in \mathbb{R}$, $\tilde{u} - k^2 < 0$, то, обозначив $-a^2 = \tilde{u} - k^2$, решение можно записать в виде

$$\psi(x) = C_1 \cos(ax) + C_2 \sin(ax)$$

.

2 Задача Штурма-Лиувилля на компактных графах

Рассмотрим произвольный взвешенный граф с рёбрами конечной длины и семейство операторов $\{L_i\}_{i=1}^B$

$$L_i = -\frac{d^2}{dx_i^2} + u_i(x_i). \quad (5)$$

Каждому ребру b сопоставим отрезок $[0, l_b]$, где l_b — длина ребра. Определим следующие пространства:

$$\begin{aligned} D(L_i) &= \varphi(x_i) : \varphi \in C_0^\infty[0, l_i], \\ L_2(G) &= \sum_{i=1}^B \oplus L_2[0, l_i], \\ D(G) &= \sum_{i=1}^B \oplus C_0^\infty[0, l_i], \quad D(G) \subset L_2(G) \end{aligned}$$

и оператор

$$L_G = \sum_{i=1}^B \oplus L_i. \quad (6)$$

Поставим условия в вершинах графа следующим образом:

1. ψ непрерывна в узлах графа,
2. сумма производных волновой функции по всем дугам с учётом ориентации рёбер в каждой вершине равна нулю.

Данные граничные условия называют законами Кирхгофа для квантовых графов [2].

Они имеют физический смысл: первое условие соответствует непрерывности волновой функции в вершине, второе условие соответствует сохранению потока в вершине.

Имеют место следующие теоремы [11]:

Теорема 2.1. *Дифференциальное выражение L_G и граничные условия 1) и 2) определяют самосопряженный в $L_2(G)$ оператор.*

Теорема 2.2. *Спектр оператора L_G на компактном графе с локально измеримым потенциалом дискретен.*

Определение 2.1. *Задача Штурма-Лиувилля на компактном графе G — это задача поиска спектра оператора L_G .*

Определение 2.2. *Волновая функция ψ — это B -компонентный вектор*

$$\psi = (\psi_{b_1}(x_{b_1}), \psi_{b_2}(x_{b_2}), \dots, \psi_{b_B}(x_{b_B}))^T,$$

где множество $\{b_i\}_{i=1}^B$ состоит из различных ребер графа G .

На каждом ребре b компонента волновой функции $\psi_b(x_b)$ удовлетворяет одномерному стационарному уравнению Шрёдингера:

$$\left(-\frac{d^2}{dx_i^2} + u_i(x_i)\right) \psi_b(x_i) = k^2 \psi_b(x_i) \quad (b = [i, j]), \quad (7)$$

а в каждой вершине — граничным условиям 1) и 2). Заметим, что введенная ранее ориентация на рёбрах не является существенным требованием, и служит лишь для удобства вычисления производных по исходящим дугам.

3 Задача рассеяния на некомпактных графах

Рассмотрим произвольный некомпактный граф, который можно получить добавлением некоторого количества полубесконечных дуг к компактному графу. Аналогичным образом можно определить самосопряженный оператор L_G . Отличие состоит лишь в том, что некоторые операторы $\{L_i\}$ действуют в $L_2(0, \infty)$ и $D(L_i) = \{\varphi : \varphi \in C_0^\infty[0, \infty]\}$.

$$L_2(G) = \sum_{B'} \oplus L_2[0, l_i] \oplus \sum_{B''} \oplus L_2[0, \infty],$$

$$D(G) = \sum_{B'} \oplus C_0^\infty[0, l_i] \oplus \sum_{B''} \oplus C_0^\infty[0, \infty]$$

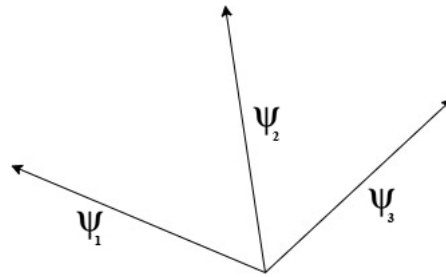
Исходя из нужд задачи рассеяния потенциалы u_i на соответствующих ребрах будем считать вещественными измеримыми функциями с конечным первым моментом

$$\int_0^\infty (1 + x_i) |u_i(x_i)| dx_i < \infty. \quad (8)$$

Рассмотрим несколько примеров.

3.1 Задача рассеяния на звёздных графах

Рассмотрим задачу рассеяния на графе-звезде, содержащем 3 дуги и 1 вершину, все потенциалы нулевые. Ищем решение в виде:



$$\psi_1(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx},$$

$$\psi_2(x) = C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx},$$

$$\psi_3(x) = C_5 e^{ikx} + C_6 e^{-ikx}.$$

Сопутствующая система имеет вид:

$$\begin{cases} \psi_1(k, 0) = \psi_2(k, 0), \\ \psi_1(k, 0) = \psi_3(k, 0), \\ \psi'_1(k, 0) + \psi'_2(k, 0) + \psi'_3(k, 0) = 0. \end{cases}$$

Перепишывая систему в терминах $C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6$, получим СЛАУ вида $Ac = b$:

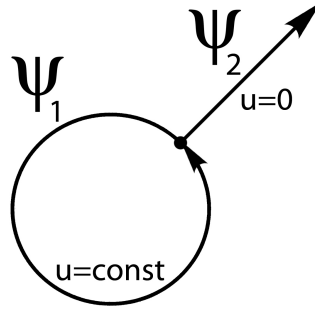
$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Решая эту систему, получим искомую матрицу рассеяния:

$$S(k) = \begin{pmatrix} -1/3 & 2/3 & 2/3 \\ 2/3 & -1/3 & 2/3 \\ 2/3 & 2/3 & -1/3 \end{pmatrix}$$

3.2 Петля с n полубесконечными рёбрами

Рассмотрим граф,



состоящий из петли и одного полубесконечного ребра. Предположим, что на петле длины a задан некоторый константный потенциал, а на полубесконечном ребре потенциал нулевой. Ищем решение в виде

$$\psi(k) = \{\psi_1(k, x), \psi_2(k, x)\}, \text{ где}$$

$$\psi_1 = c_1 \cdot e^{\sqrt{u-k^2} \cdot x} + c_2 \cdot e^{-\sqrt{u-k^2} \cdot x}, \quad x \in [0, a],$$

$$\psi_2 = c_3 \cdot e^{ikx} + c_4 \cdot e^{-ikx}, \quad x \in [0, +\infty)$$

Сопутствующая система законов Кирхгофа имеет вид:

$$\begin{cases} \psi_1(k, 0) = \psi_1(k, a), \\ \psi_1(k, 0) = \psi_2(k, 0), \\ \psi'_1(k, 0) - \psi'_1(k, a) + \psi'_2(k, 0) = 0. \end{cases}$$

Без ограничений общности, $c_3 = R$, $c_4 = 1$. Это предположение соответствует ситуации, в которой волновой пакет единичной амплитуды попадает в граф из бесконечно удалённой точки по бесконечному ребру, рассеивается на графе, а затем возвращается с некоторым коэффициентом R . Переписывая систему в терминах c_1, c_2, R , получим СЛАУ вида $Ac = b$:

$$A = \begin{pmatrix} 1-e^{\sqrt{u-k^2}} & 1-e^{-\sqrt{u-k^2}} & 0 \\ 1 & 1 & -1 \\ \sqrt{u-k^2}-\sqrt{u-k^2} \cdot e^{\sqrt{u-k^2}} & -\sqrt{u-k^2}+\sqrt{u-k^2} \cdot e^{\sqrt{u-k^2}} & ik \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ ik \end{pmatrix}$$

Обозначив $p = \sqrt{u - k^2}$, получим формулу для коэффициента отражения:

$$R(k, u) = \frac{(ik + 2p) e^{2pa} - ik - 4pe^{pa} + 2p}{(ik - 2p) e^{2pa} - ik + 4pe^{pa} - 2p} \quad (9)$$

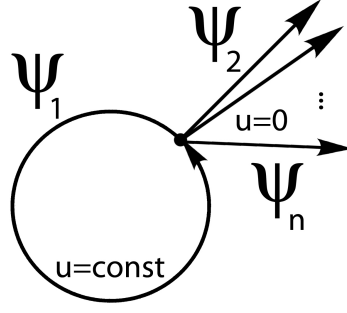
Непосредственным вычислением можно убедиться, что

Теорема 3.1. $|R(k, u)| = 1$

В случае $n = 1$ матрица рассеяния одномерна: $S = (R(k, u))$. В случае $n \geq 1$ матрица рассеяния имеет размер $(n - 1) \cdot (n - 1)$ (по количеству рёбер бесконечной длины).

Физический смысл матрицы рассеяния понятен: в i -й строке на i -м месте находится коэффициент отражения R_{ii} , на j -м месте стоит коэффициент прохождения T_{ij} , $i \in \{1, \dots, n - 1\}$, $j \in \{1, \dots, n - 1\} \setminus i$. Это соответствует ситуации, в которой волновой пакет единичной амплитуды попадает в граф из бесконечно удалённой точки по бесконечному ребру с номером i , рассеивается на графе, а затем возвращается с коэффициентом отражения R_{ii} по ребру с номером i , с коэффициентами прохождения T_{ij} по рёбрам с номерами $j \in \{1, \dots, n - 1\} \setminus i$.

Для петли с n полубесконечными рёбрами имеем СЛАУ $(n + 1) \cdot (n + 1)$ с матрицей:



$$A = \begin{pmatrix} 1-e^{\sqrt{u-k^2}} & 1-e^{-\sqrt{u-k^2}} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & -1 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ \sqrt{u-k^2}-\sqrt{u-k^2}.e^{\sqrt{u-k^2}} & -\sqrt{u-k^2}+\sqrt{u-k^2}.e^{\sqrt{u-k^2}} & ik & \dots & \dots & ik \end{pmatrix}$$

и набором правых частей:

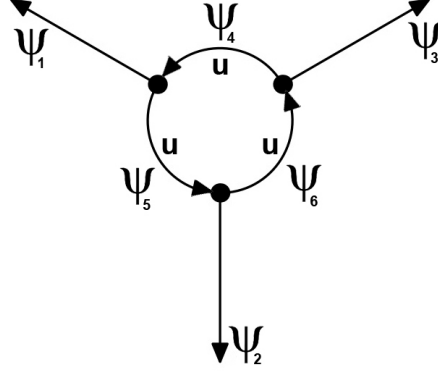
$$b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ ik \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ ik \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ ik \end{pmatrix}.$$

Решая первую СЛАУ относительно $C_1, C_2, C_3, C_5, \dots, C_{2n-1}$ с различными правыми частями, будем последовательно получать строки матрицы рассеяния:

- $C_3 = R_{22}, C_5 = T_{23}, \dots, C_{2n-1} = T_{2 \ 2n-1}$
- $C_3 = T_{32}, C_5 = R_{33}, \dots, C_{2n-1} = T_{3 \ 2n-1}$
- \dots
- $C_3 = T_{2n-1 \ 2}, C_5 = T_{2n-1 \ 3}, \dots, C_{2n-1} = R_{2n-1 \ 2n-1}$

3.3 Кольцо с n полубесконечными рёбрами

Также определённый интерес представляет задача рассеяния на кольцах с n полубесконечными рёбрами. В качестве примера рассмотрим следующий граф с 3 рёбрами единичной длины, на компактной части задан константный потенциал:



Ищем решение в виде

$$\psi(k) = \{\psi_1(k, x), \psi_2(k, x)\}, \psi_3(k, x), \psi_4(k, x), \psi_5(k, x), \psi_6(k, x), \text{ где}$$

$$\psi_1 = c_1 \cdot e^{ikx} + c_2 \cdot e^{-ikx}, \quad x \in [0, 1],$$

$$\psi_2 = c_3 \cdot e^{ikx} + c_4 \cdot e^{-ikx}, \quad x \in [0, 1],$$

$$\psi_3 = c_5 \cdot e^{ikx} + c_6 \cdot e^{-ikx}, \quad x \in [0, 1],$$

$$\psi_4 = c_7 \cdot e^{\sqrt{u-k^2}x} + c_8 \cdot e^{-\sqrt{u-k^2}x}, \quad x \in [0, +\infty),$$

$$\psi_5 = c_9 \cdot e^{\sqrt{u-k^2}x} + c_{10} \cdot e^{-\sqrt{u-k^2}x}, \quad x \in [0, +\infty),$$

$$\psi_6 = c_{11} \cdot e^{\sqrt{u-k^2}x} + c_{12} \cdot e^{-\sqrt{u-k^2}x}, \quad x \in [0, +\infty).$$

Обозначив $p = \sqrt{u - k^2}$, получим сопутствующую систему законов Кирхгофа с нулевой правой частью:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e^p & -e^{-p} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ ik & -ik & 0 & 0 & 0 & 0 & -pe^p & pe^{-p} & p & -p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e^p & -e^{-p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & ik & -ik & 0 & 0 & 0 & 0 & -pe^p & pe^{-p} & p & -p \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e^p & -e^{-p} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ik & -ik & p & -p & 0 & 0 & -pe^p & pe^{-p} \end{pmatrix}$$

Подставляя поочерёдно в эту систему наборы

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 = R_{11}, \\ c_2 = 1, \\ c_3 = T_{12}, \\ c_4 = 0, \\ c_5 = T_{13}, \\ c_6 = 0, \end{array} \right. , \left\{ \begin{array}{l} c_1 = T_{21}, \\ c_2 = 0, \\ c_3 = R_{12}, \\ c_4 = 1, \\ c_5 = T_{23}, \\ c_6 = 0, \end{array} \right. , \left\{ \begin{array}{l} c_1 = T_{31}, \\ c_2 = 0, \\ c_3 = T_{32}, \\ c_4 = 0, \\ c_5 = R_{13}, \\ c_6 = 1, \end{array} \right.$$

получим искомые данные рассеяния:

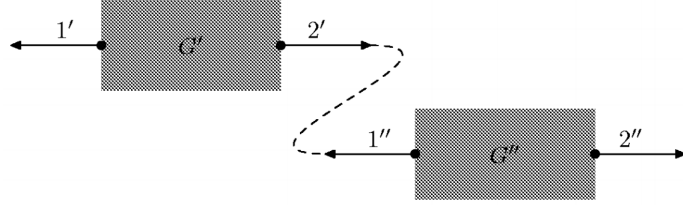
- $C_1 = R_{11}, C_3 = T_{12}, C_5 = T_{13},$
- $C_1 = T_{21}, C_3 = R_{22}, C_5 = T_{23},$
- $C_1 = T_{31}, C_3 = T_{32}, C_5 = R_{33}.$

TODO: выписать явный вид решений

4 Спектральная хирургия квантовых графов

Основным приложением теории квантового рассеяния является моделирование полупроводниковых структур. Но в настоящих полупроводниках число молекул очень велико! Поэтому для решения задач моделирования используют методы хирургии квантовых графов. Основная идея данных методов заключается в том, что сначала решается дифференциальная задача рассеяния на примитивном графе, а затем примитивы склеиваются друг с другом согласно некоторому правилу с известным преобразованием данных рассеяния.

В работе А. Н. Бондаренко и В. А. Дедка [12] рассмотрен метод склейки графов, содержащих неизвестную компактную часть и две бесконечные дуги. Предполагается, что потенциалы на бесконечных рёбрах нулевые.



Была поставлена задача: рассмотреть процесс склейки двух графов, содержащих неизвестную компактную часть и три полубесконечных дуги, по двум парам дуг.



Рассмотрим граф G' , его данные рассеяния известны. Для решения поставленной задачи построим рассеивающий оператор SC , сопоставляющий решениям с двух правых бесконечных дуг решение на левой бесконечной дуге.

Поскольку мы знаем общий вид решения на полубесконечных дугах

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= ae^{-ikx} + be^{ikx}, \\ \psi_2(x) &= ce^{-ikx} + de^{ikx}, \\ \psi_3(x) &= ee^{-ikx} + fe^{ikx},\end{aligned}\tag{10}$$

то наша задача состоит в построении линейного оператора SC , такого что:

$$SC \begin{pmatrix} c \\ d \\ e \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Разложим волновые функции по всевозможным исходам:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \alpha (e^{-ikx} + Re^{ikx}) + \beta (Te^{ikx}) + \gamma (Te^{ikx}) = \\ &= \alpha e^{-ikx} + (\alpha R + \beta T + \gamma T) e^{ikx}, \\ \psi_2 &= \alpha (Te^{ikx}) + \beta (e^{-ikx} + Re^{ikx}) + \gamma (Te^{ikx}) = \\ &= \beta e^{-ikx} + (\alpha T + \beta R + \gamma T) e^{ikx}, \\ \psi_3 &= \alpha (Te^{ikx}) + \beta (Te^{ikx}) + \gamma (e^{-ikx} + Re^{ikx}) = \\ &= \gamma e^{-ikx} + (\alpha T + \beta T + \gamma R) e^{ikx}. \end{aligned} \tag{11}$$

Тогда из (10) и (11) получим СЛАУ на a, b, c, d, e, f : Получили СЛАУ на a, b, c, d, e, f :

$$\begin{cases} a = \alpha, \\ b = \alpha R + \beta T + \gamma T, \\ c = \beta, \\ d = \alpha T + \beta R + \gamma T, \\ e = \gamma, \\ f = \alpha T + \beta T + \gamma R. \end{cases}$$

Выражая a, b через c, d, e, f , получим:

$$\begin{aligned} a &= (f - cT - eR) T^{-1} \\ b &= (f - cT - eR) T^{-1} R + cT + eT \end{aligned}$$

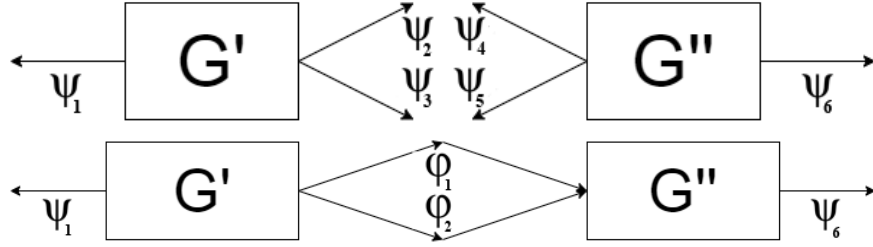
А также условие совместности:

$$f - cT - eR = d - cR - eT \quad (12)$$

Тогда

$$\begin{aligned} SC \begin{pmatrix} c \\ d \\ e \\ f \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f - cT - eR)T^{-1} \\ (f - cT - eR)T^{-1}R + cT + eT \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & -RT^{-1} & T^{-1} \\ T - R & 0 & T - RT^{-1}R & T^{-1}R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \\ e \\ f \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Приступим к слейке графов G' и G'' :



Ясно, что $\psi_1(x), \varphi_1(x), \varphi_1(1-x), \varphi_2(x), \varphi_2(1-x), \psi_2(x)$ — решения задач рассеяния для графов G' и G'' на полубесконечных дугах.

Пусть решения на склеенном графе определены следующим образом:

- $\psi_1(x) = e^{-ikx} + R'e^{ikx}$
- $\varphi_1(x) = ae^{-ikx} + be^{ikx}$
- $\varphi_2(x) = ce^{-iks} + de^{ikx}$
- $\psi_2(x) = T'e^{ikx}$

Заметим, что

$$\begin{aligned} \varphi_1(1-x) &= be^{ik}e^{-ikx} + ae^{-ik}e^{ikx}, \\ \varphi_2(1-x) &= de^{ik}e^{-ikx} + ce^{-ik}e^{ikx}, \end{aligned}$$

Тогда

$$SC \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ R' \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$SC \begin{pmatrix} be^{ik} \\ ae^{-ik} \\ de^{ik} \\ ce^{-ik} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ T' \end{pmatrix} \quad (14)$$

Отсюда получаем два уравнения на коэффициенты a, b, c, d :

$$\begin{aligned} (d - aT - cR) T^{-1} &= 1 \\ (ce^{-ik} - be^{ik}T - de^{ik}R) T^{-1} &= 0 \end{aligned}$$

Оставшиеся 2 уравнения получим из условия совместности (12) для оператора SC :

$$\begin{aligned} d - aT - cR &= b - aR - cT \\ ce^{-ik} - be^{ik}T - de^{ik}R &= ae^{-ik} - be^{ik}R - de^{ik}T \end{aligned}$$

Запишем получившуюся СЛАУ в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} -T & 0 & -R & 1 \\ 0 & -e^{ik}T & e^{-ik} & -e^{ik}R \\ R - T & -1 & T - R & 1 \\ -e^{-ik} & e^{ik}(R - T) & e^{-ik} & e^{ik}(T - R) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Зная решение этой системы,

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{(R+T)e^{ik}T}{-e^{-ik} + (R+T)^2 e^{ik}} \\ -\frac{e^{-ik}T}{-e^{-ik} + (R+T)^2 e^{ik}} \\ -\frac{(R+T)e^{ik}T}{-e^{-ik} + (R+T)^2 e^{ik}} \\ -\frac{e^{-ik}T}{-e^{-ik} + (R+T)^2 e^{ik}} \end{pmatrix}$$

Из соотношения (13) получим искомое значение коэффициента R' :

$$R' = \frac{-e^{-ik} R + e^{ik} (R - T) (R + 2T) (R + T)}{-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik}}$$

Аналогично, из соотношения (14) получим T' :

$$T' = \frac{-R (R + T) e^{ik} e^{-ik} + e^{ik} e^{-ik} (R + 2T) (R - T)}{-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik}}$$

Однако приведённые выше выкладки верны только при выполнении условий $T \neq 0$ и $-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik} \neq 0$. Рассмотрим их подробнее.

Условие $T = 0$ эквивалентно полному отражению волны при попадании частицы в компактную часть графа при движении по полубесконечному ребру. Поскольку склеиваемые графы G' и G'' имеют одинаковые данные рассеяния, то итоговая S -матрица будет иметь вид:

$$S(k) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Условие $-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik} \neq 0$ может показаться недостижимым при добавлении условия нормировки $RR^* + TT^* + TT^* = 1$, однако можно подобрать такие значения R , T , k , что знаменатель обратится в нуль, но при этом будет выполнено условие нормировки. Чтобы показать это, перепишем неравенство:

$$-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik} \neq 0$$

$$(R + T)^2 e^{ik} = e^{-ik}$$

$$(R + T)^2 = e^{-2ik}$$

$$R + T = e^{-ik}$$

$$T = -R + e^{-ik}$$

И подставим полученное выражение для T в условие нормировки:

$$RR^* + 2TT^* = 1$$

$$RR^* + 2(-R + e^{-ik})(-R^* + e^{ik}) = 1$$

$$RR^* + 2(RR^* - Re^{ik} - R^*e^{-ik} + 1) = 1$$

$$3RR^* - 2Re^{ik} - 2R^*e^{-ik} = -1$$

Запишем коэффициент отражения в показательной форме: $R = \rho e^{i\varphi}$.

Тогда полученное ранее выражение примет вид:

$$3\rho^2 - 2\rho e^{i(\varphi+k)} - 2\rho e^{-i(\varphi+k)} = 1$$

Выберем φ таким образом, чтобы $\varphi + k = 0$. Тогда определим ρ из квадратного уравнения $3\rho^2 - 4\rho - 1 = 0$. Это уравнение имеет один положительный корень. Значит, удалось подобрать такие R , T , k , при которых полученное правило склейки не работает. Возможно, условие $-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik} \neq 0$ всё же будет являться недостижимым в задачах рассеяния, но для того, чтобы показать это, нужно привлекать дополнительные соображения.

Таким образом, доказана

Теорема 4.1. Пусть даны два одинаковых графа G' , G'' , содержащих три полубесконечных дуги и неизвестную компактную часть. Пусть для данных рассеяния графов G' , G'' выполнено условие совместности. Пусть также $T \neq 0$, $R + T \neq e^{-ik}$

Тогда данные рассеяния графа, полученного склейкой графов G' , G'' по двум полубесконечным дугам в дугу единичной длины, имеют вид $\begin{pmatrix} R' & T' \\ T' & R' \end{pmatrix}$, где

$$R' = \frac{-e^{-ik}R + e^{ik}(R - T)(R + 2T)(R + T)}{-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik}},$$

$$T' = \frac{-R(R + T) + (R + 2T)(R - T)}{-e^{-ik} + (R + T)^2 e^{ik}}.$$

Основное преимущество данного подхода заключается в том, что для решения задачи рассеяния на полупроводниковых структурах сначала решается относительно простая дифференциальная задача для примитивного графа, а затем при помощи алгебраических операций это решение масштабируется до всего искомого графа.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] J. R. Yusupov, K. K. Sabirov, M. Ehrhardt, D. U. Matrasulov, *Transparent Quantum Graphs*, Phys. Lett. A **383**, 2382 (2019).
- [2] V. Kostykin, R. Schrader, *Kirchhoff's Rule for Quantum Wires* J. Phys. A: Math. Gen. Vol.32, (1999), 595–630.
- [3] H. Kuhn, *A Quantum-Mechanical Theory of Light Absorption of Organic Dyes and Similar Compounds*, J. Chem. Phys. **17** (1949), <https://doi.org/10.1063/1.1747143>.
- [4] S. Alexander, *Superconductivity of networks. A percolation approach to the effects of disorder*, Phys. Rev. B **27**, 1541 (1983).
- [5] D. Kowal, U. Sivan, O. Entin-Wohlman, Y. Imry, *Transmission through multiply-connected wire systems*, Phys. Rev. B **42**, 9009 (1990).
- [6] T. Kottos, U. Smilansky, *Quantum chaos on graphs*, Phys. Rev. Lett. **79**, 4794–7 (1997).
- [7] A. Kostenko, N. Nicolussi, *Spectral estimates for infinite quantum graphs*, Calc. Var. **58**, 15 (2019), Spectral estimates for infinite quantum graphs.
- [8] P. Kurasov, A. Serio, *Optimal Potentials for Quantum Graphs*, Ann. Henri Poincare **20**, 1517–1542 (2019). <https://doi.org/10.1007/s00023-019-00783-6>
- [9] D. A. Eremin, E. N. Grishanov, D. S. Nikiforov, I. Y. Popov, *Wave dynamics on time-dependent graph with Aharonov-Bohm ring*, Наносистемы: физика, химия, математика, **9**:4 (2018), 457–463. <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2018-9-4-457-463>
- [10] A. A. Boitsev, I. Y. Popov, *A model of an electron in a quantum graph interacting with a two-level system*, Наносистемы: физика, химия, математика, **10**:2 (2019), 131–140. <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2019-10-2-131-140>
- [11] Н. И. Герасименко, Б. С. Павлов, *Задача рассеяния на некомпактных графах*, ТМФ, **74**:3 (1988), 345 – 359.

- [12] А. Н. Бондаренко, В. А. Дедок, *Спектральная хирургия квантовых графов*, Сиб. журн. индустр. матем., **7**:4 (2004), 16–28.
- [13] Ю. Г. Пейсахович, А. А. Штыгашевич, *Одномерная квантовая механика*, монография, Новосибирск, Изд-во НГТУ, 2007.
- [14] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Издание 4-е, М.:Наука 1989, 768 с. - («Теоретическая физика», том III) - ISBN 5-02-014421-5.
- [15] Л. Д. Фаддеев, *Свойства S -матрицы одномерного уравнения Шрёдингера*, Труды МИАН, 1964, Т.73, с. 314–336.