

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ**

Факультет естественнонаучный

Направление 01.04.00- Прикладная математика и информатика

Специализация 01.04.02.68 Математическое моделирование

Академическая степень магистр

Кафедра высшей математики Группа 6742

# **МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

**на тему**

## **Спектральная задача для квантового графа типа цепочки коле с разветвлением в магнитном поле**

Автор магистерской диссертации Смирнов П.И. (подпись)  
( Фамилия, И., О. )

Научный руководитель Попов И.Ю. (подпись)  
( Фамилия, И., О. )

Руководитель магистерской программы Попов И.Ю. (подпись)  
( Фамилия, И., О. )

:

**К защите допустить**

Зав. кафедрой Попов И.Ю. (подпись)  
( Фамилия, И., О. )

“        ”                      20        г.

Санкт-Петербург, 20        г.

Магистерская диссертация выполнена с оценкой \_\_\_\_\_

Дата защиты “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Секретарь ГАК \_\_\_\_\_

Листов хранения \_\_\_\_\_

Чертежей хранения \_\_\_\_\_

## Содержание

|            |   |           |
|------------|---|-----------|
| <b>I</b>   | <b>Введение</b>   | <b>1</b>  |
| <b>II</b>  | <b>Обзор результатов предшественников</b>                   | <b>2</b>  |
| <b>1</b>   | <b>Прямая бесконечная цепочка</b>                           | <b>3</b>  |
| <b>2</b>   | <b>Бесконечная цепочка с изгибом</b>                        | <b>5</b>  |
| <b>III</b> | <b>Постановка задачи и её решение</b>                       | <b>8</b>  |
| <b>3</b>   | <b>Система в отсутствии магнитного поля</b>                 | <b>8</b>  |
| 3.1        | Получение характеристического уравнения . . . . .           | 10        |
| 3.2        | Изучение особых случаев . . . . .                           | 14        |
| <b>4</b>   | <b>Система в магнитном поле</b>                             | <b>14</b> |
| 4.1        | Прямая цепочка колец в магнитном поле и существенный спектр | 16        |
| 4.1.1      | Трансфер-матрица в магнитном поле . . . . .                 | 16        |
| 4.1.2      | Спектральный анализ трансфер-матрицы . . . . .              | 18        |
| <b>IV</b>  | <b>Заключение</b>   | <b>23</b> |

## Часть I

## Введение

В последние годы все больше внимания со стороны не только науки, но и государства уделяется нанотехнологиям. Неслучайно был сформирован концерн «РОСНАНО» и открыты соответствующие отделения при многих институтах и университетах страны. На наноразмерные технологии возлагают сегодня большие надежды. В этой сравнительно молодой научной сфере ищут и находят успех множество ученых всего мира. Одно из направлений исследовательской деятельности связано с изучением свойств кристаллов.

Теоретическое изучение свойств одномерного слоя атомов углерода началось еще в середине прошлого века. Оно не было очень активным и плодотворным, так как одномерный слой углерода создать не удавалось и особых надежд исследователи не имели. Получить же этот необычный материал, названный графеном, удалось совсем недавно, в 2010 году, что вызвало заметный интерес к его исследованию.

Уже найдено много возможностей для использования графена. Среди них важное место занимает применение в качестве основы для электрических схем. Сам материал в этом случае будет являться проводником, а электрическая цепь будет формироваться присадкой на лист графена атомов

других веществ. Эти атомы, помещенные в узлы кристаллической решетки проводящего графена, будут изменять валентности узлов, препятствуя прохождению через них заряда.

Исследование и описание наноструктур имеют особенности, вызванные их чрезвычайно малыми размерами. Для описания систем размером в несколько атомов необходимо использовать средства квантовой физики. Работая в установленных теорией рамках, мы будем описывать заряженную частицу, распространяющуюся по графену, волновой функцией. Сам же материал будем представлять по средством квантового графа, описанного далее.

Нас в данной работе не интересует лист графена целиком, но интересуют его полоса, как проводник для заряда, и, в особенности, разветвление этой полосы. Такая система может быть весьма приближенно описана квантовым графом  $G$ , представляющем из себя разветвленную цепочку колец. Спектральные свойства такого графа представляют самостоятельный интерес и являются объектом настоящего исследования.

Квантовый граф это широко используемая математическая модель для наносистем (см., [1, 2, 3]). С физической точки зрения наиболее интересны спектральные и транспортные свойства системы. Также как и граф вида звезды наш структура довольно проста и не дает сплошного спектра. Ситуация меняется, когда мы рассматриваем декорированный граф или граф с циклами, особенно не компактный (см., [4, 5]). Для данной системы возникает интригующий вопрос, касающийся существования связанных состояний. Для начала рассмотрим периодическую цепочку спаренных колец, соединенных в точках касания. Соответствующий оператор Шредингера имеет бесконечно вырожденные собственные числа и абсолютно непрерывный спектр (см. [6]). В [6] также изучена цепочка колец с изгибом. В этом случае появляется дискретный спектр (связанные состояния). Эта система, в некотором смысле, является моделью квантового волновода [7, 9]. Преимущество квантового графа это его единичная размерность. Она позволяет написать спектральное уравнение в явном виде. Другое достоинство это возможность метод трансфер-матрицы (матрицы монодромии) для выведения спектрального уравнения. [10, 11].

Цель работы заключается в отыскании связанных состояний частицы «живущей» на квантовом графе  $G$  (имеющей своим пространством состояний  $L_2(G)$ ), то есть состояний соответствующих движению частицы в конечной области пространства. Исследование делится на две части: *система без магнитного поля* и *система в магнитном поле, перпендикулярном её плоскости*. В первой части, основываясь на результаты представленных в работе [6], мы проводим анализ точечного спектра и получаем для него характеристическое уравнение. Во второй части работы изучается собственный спектр системы в магнитном поле.

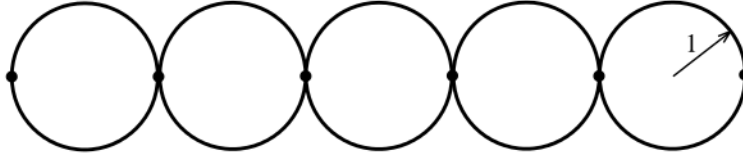


Рис. 1: прямая цепочка колец

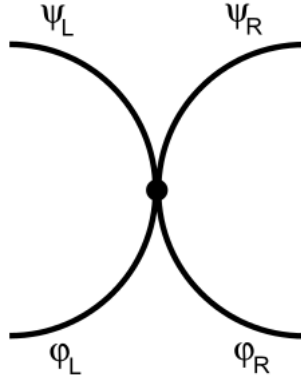


Рис. 2: Элементарная ячейка периодической системы

## Часть II

# Обзор результатов предшественников

В своей работе [6] Дюкло, Экснер и Тюрк произвели детальный анализ спектральных свойств прямой бесконечной цепочки колец и цепочки колец с изгибом. Прежде чем начать изучение своей модели, мы проведем обзор полученных ими результатов.

### 1 Прямая бесконечная цепочка

Начнем с рассмотрения наиболее простой модели, допускающей явное решение, - бесконечного периодического графа  $G_0$  составленного из массива колец единичного радиуса, соединенных в точках касания figure 1. Пространством состояний безспиновой нерелятивистской частицы, «живущей» на  $G_0$ , будет  $L^2(G_0)$ . Будем предполагать систему в отсутствии внешних полей. Что бы максимально упростить рассмотрение, выберем такую систему единиц измерения, где физические константы будут равны единице: положим

$$\hbar = 2m = 1$$

Для получения самосопряженного оператора необходимо наложить соответствующие граничные условия в узлах графа. В нашей работе мы будем использовать так называемое  $\delta$ -соединение, характеризуемое условиями:

$$\begin{aligned}\Psi_j(0) &= \Psi_k(0) = \Psi(0), \quad j, k \in \{1, 2, 3, \dots, \mathbb{N}\} \\ \sum_{j=1}^n \Psi_j'(0) &= \alpha \Psi(0)\end{aligned}\tag{1}$$

где  $j, k$  индексируют множество дуг исходящих из вершины. В нашем случае  $n = 4$  - и  $\alpha \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  - это константа соединения одинаковая во всех вершинах. Положим так же  $\alpha \neq 0$ .

Определим частичный гамильтониан  $H_0$  через отрицательный лапласиан, действующий как отрицательный лапласиан на каждом ребре графа. В область определения гамильтониана  $H_0$  войдут все функции из  $W_{loc}^{2,2}(G_0)$ , удовлетворяющие граничным условиям (1) в узлах графа. В виду периодичности модели, спектр оператора может быть вычислен с использованием разложения Блоха-Флоке. Давайте рассмотрим элементарную ячейку с волновыми функциями, указанными на figure 2, и зададимся вопросом о спектре компонент Флоке. Поскольку гамильтониан действует как отрицательная вторая производная, каждая компонента собственной функции с энергией  $E = k^2 \neq 0$  является линейной комбинацией функций  $e^{\pm ikx}$ . Для положительных энергий положим  $k$  вещественным и положительным. Для отрицательных значений положим  $k = i\kappa$ ,  $\kappa > 0$ . Случай нулевой энергии обсудим отдельно. Для ненулевых энергий находим волновые функции на элементарной ячейке в виде

$$\begin{aligned}\psi_L &= C_L^+ e^{ikx} + C_L^- e^{-ikx}, \quad x \in [-\frac{\pi}{2}, 0], \\ \psi_L &= C_L^+ e^{ikx} + C_L^- e^{-ikx}, \quad x \in [0, \frac{\pi}{2}], \\ \phi_R &= D_R^+ e^{ikx} + D_R^- e^{-ikx}, \quad x \in [-\frac{\pi}{2}, 0], \\ \phi_R &= D_R^+ e^{ikx} + D_R^- e^{-ikx}, \quad x \in [0, \frac{\pi}{2}].\end{aligned}\tag{2}$$

Поскольку в точке контакта двух колец имеет место d-соединение, получаем условия:

$$\psi_L(0) = \psi_R(0) = \phi_L(0) = \phi_R,$$

$$-\psi_L'(0) + \psi_R'(0) - \phi_L'(0) + \phi_R'(0) = \alpha \cdot \psi_L(0).\tag{3}$$

С другой стороны свободные концы ячейки удовлетворяют условиям Флоке:

$$\begin{aligned}\psi_R(\frac{\pi}{2}) &= e^{i\theta} \psi_L(-\frac{\pi}{2}), & \psi_R'(\frac{\pi}{2}) &= e^{i\theta} \psi_L'(-\frac{\pi}{2}), \\ \phi_R(\frac{\pi}{2}) &= e^{i\theta} \phi_L(-\frac{\pi}{2}), & \phi_R'(\frac{\pi}{2}) &= e^{i\theta} \phi_L'(-\frac{\pi}{2}),\end{aligned}\tag{4}$$

где  $\theta \in [-\pi, \pi]$ .

Подставляя (2) в (3) и (4) получаем

$$C_X^+ \cdot \sin(k\pi) = D_X^+ \cdot \sin(k\pi), \quad C_X^- \cdot \sin(k\pi) = D_X^- \cdot \sin(k\pi),$$

где X означает L или R.

Отсюда следует  $C_X^+ = C_X^-$  и  $D_X^+ = D_X^-$  при  $k \notin \mathbb{Z}$ , то есть решения на верхних и нижних полудугах симметричны. Более того, из (3) и (4) мы получаем уравнение для фазового множителя  $e^{i\theta}$ :

$$e^{2i\theta} - e^{i\theta} \left( 2\cos k\pi + \frac{\alpha}{2k} \sin k\pi \right) + 1 = 0. \quad (5)$$

Это уравнение имеет вещественные коэффициенты при  $k \in \mathbb{R} \cup i\mathbb{R} \setminus \{0\}$  и дискриминант

$$D = \left( 2\cos k\pi + \frac{\alpha}{2k} \sin k\pi \right)^2 - 4.$$

В своей работе [1] Дюкло, Экснер и Тюрек доказали следующую теорему о спектре гамильтониана данной системы, основанную на анализе условий изложенных выше.

**Теорема 1.**

*Спектр оператора  $H_0$  содержит собственные числа равные  $n^2$ ,  $n \in \mathbb{N}$  и полосы абсолютно непрерывного спектра удовлетворяющие следующим условиям.*

*При  $\alpha > 0$  каждая спектральная полоса содержит интервал  $(n^2, (n+1)^2]$ ,  $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ , причем её верхняя граница совпадает с  $(n+1)^2$ .*

*При  $\alpha < 0$ , в каждом интервале  $(n^2, (n+1)^2]$ ,  $n \in \mathbb{N}$  есть ровно одна спектральная полоса и её нижняя граница совпадает с  $n^2$ . Также есть спектральная полоса с нижней границей равной  $-\kappa^2$ , где  $\kappa$  - наибольшее решение уравнения*

$$\left| \cos k\pi + \frac{\alpha}{4} \frac{\sinh k\pi}{\kappa} \right| = 1. \quad (6)$$

*Верхняя граница этой полосы зависит от  $\alpha$ . Если  $-8/\pi < \alpha < 0$ , то она равна  $k^2$ , где  $k$  есть решение уравнения*

$$\left| \cos k\pi + \frac{\alpha}{4} \frac{\sinh k\pi}{k} \right| = 1,$$

*содержащееся в  $(0, 1)$ . Для  $\alpha < -8/\pi$  верхняя граница отрицательна:  $-\kappa^2$ , где  $\kappa$  - наименьшее решение (6). Для  $\alpha = -8/\pi$  граница равна 0.*

*Для  $\alpha = 0$  спектр представляет из себя положительную ось:  $\sigma(H_0) = [0, +\infty)$ .*

## 2 Бесконечная цепочка с изгибом

Пусть теперь бесконечная цепочка, описанная в section 1, имеет изгиб, как показано на figure 3. Мы назовем возмущенный граф  $G_\vartheta$ ; он отличается от  $G_0$  заменой дуг длиной  $\pi$  фиксированного кольца, которому мы назначим индекс 0, на дуги с длинами  $\pi \pm \vartheta$ . Угол изгиба  $\vartheta$  может принимать значения из промежутка  $(0, \pi)$ . Поскольку  $G_\vartheta$  имеет зеркальную симметрию, благодаря тому, что оси нулевого кольца проходят через точки  $x = 1/2(\pi \pm \vartheta)$ , оператор  $H_\vartheta$  может быть разложен в прямую сумму четного  $H^+$  оператора и нечетного  $H^-$ . Как и прежде, все компоненты волновой функции с энергией  $k^2$  будут линейными комбинациями  $e^{\pm i k x}$ . Кольцо с индексом 0 будем считать изогнутым. Благодаря зеркальной симметрии мы можем изучать

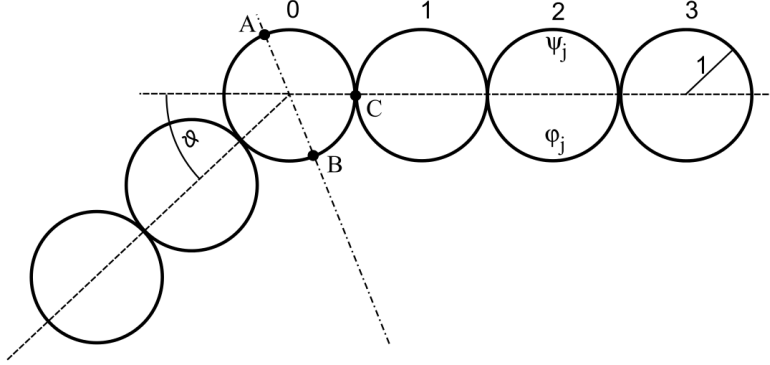


Рис. 3: цепочка с изгибом

только половину системы, проиндексированную неотрицательными индексами.

Волновая функция на кольце с номером  $j$  будет представлена парой функций  $\psi_j$  и  $\phi_j$ , соответствующих верхней и нижней дугам кольца:

$$\begin{aligned}\psi_j &= C_j^+ e^{ikx} + C_j^- e^{-ikx}, \quad x \in [0, \pi] \\ \phi_j &= D_j^+ e^{ikx} + D_j^- e^{-ikx}, \quad x \in [0, \pi]\end{aligned}\quad (7)$$

для  $j \in \mathbb{N}$ . На нулевом кольце ситуация иная. Переменные будут пробегать измененные интервалы:

$$\begin{aligned}\psi_j &= C_j^+ e^{ikx} + C_j^- e^{-ikx}, \quad x \in \left[\frac{\pi-\vartheta}{2}, \pi\right] \\ \phi_j &= D_j^+ e^{ikx} + D_j^- e^{-ikx}, \quad x \in \left[\frac{\pi+\vartheta}{2}, \pi\right]\end{aligned}\quad (8)$$

$\delta$ -соединения с параметром  $\alpha$  в точках контакта колец дают следующие условия:

$$\psi_j(0) = \phi_j(0) \quad \psi_j(\pi) = \phi_j(\pi) \quad (9)$$

и

$$\begin{aligned}\psi_j(0) &= \psi_{j-1}(\pi), \\ \psi_j'(0) + \phi_j'(0) - \psi_{j-1}'(\pi) - \phi_{j-1}'(\pi) &= \alpha \cdot \psi_j(0).\end{aligned}\quad (10)$$

Подставляя (7) в (9), мы получаем

$$C_j^+ \cdot \sin(k\pi) = D_j^+ \cdot \sin(k\pi), \quad C_j^- \cdot \sin(k\pi) = D_j^- \cdot \sin(k\pi),$$

откуда при  $k \notin \mathbb{Z}$  мы получаем симметрию



$$C_j^+ = C_j^-, \quad D_j^+ = D_j^-. \quad (11)$$

Используя условия соединения (10), мы приходим к матричной связи между коэффициентами на соседних кольцах для всех  $j \geq 2$ :

$$\begin{pmatrix} C_j^+ \\ C_j^- \end{pmatrix} = M(k, 0) \begin{pmatrix} C_{j-1}^+ \\ C_{j-1}^- \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где введено обозначение

$$M(k, 0) = \begin{pmatrix} \{e^{ik\pi(1 + \frac{\alpha}{4ik})}\} & \{e^{-ik\pi\frac{\alpha}{4ik}}\} \\ \{-e^{ik\pi\frac{\alpha}{4ik}}\} & \{e^{-ik\pi(1 - \frac{\alpha}{4ik})}\} \end{pmatrix}.$$

Матрицу  $M(k, 0)$  принято называть трансфер-матрицей. Иногда её также именуют матрицей монодромии.

Очевидно, что асимптотическое поведение норм  $(C_j^+; C_j^-)^T$  пределяется спектральными свойствами трансфер-матрицы. Пускай  $(C_j^+; C_j^-)^T$  есть собственный трансфер-вектор матрицы, отвечающий собственному числу  $\mu$ . Тогда  $|\mu| < 1$  ( $|\mu| > 1$ ,  $|\mu| = 1$ ) означает, что  $\|(C_j^+; C_j^-)^T\|$  экспоненциально убывает (возрастает, неизменна) с ростом  $j$ .

Компоненты волновой функции на  $j$ -ом кольце (как и на  $(-j)$ -ом в силу зеркальной симметрии) для обоих операторов  $H^+$  и  $H^-$  определяются  $(C_j^+; C_j^-)^T$  и, ввиду соотношения (12), зависят от  $(C_1^+; C_1^-)^T$ . Если  $(C_1^+; C_1^-)^T$  имеет неисчезающую компоненту, отвечающую собственному числу трансфер-матрицы превосходящему 1, то он не определяет собственную функцию операторов  $H^+$  и  $H^-$ . Если же  $(C_1^+; C_1^-)^T$  будет линейной комбинацией собственных векторов матрицы  $M(k, 0)$ , отвечающих собственным числам, по модулю меньшим 1 (не превосходящим 1), то коэффициенты  $C_j^\pm$  определяют собственную функцию (обобщенную собственную функцию) и соответствующие значения энергии принадлежат точечному (непрерывному) спектру операторов  $H^\pm$ . Для проведения спектрального анализа  $M(k, 0)$  матрицы мы воспользуемся её характеристическим полиномом при энергии  $E = k^2$ ,

$$\lambda^2 - 2\lambda \left( \cos k\pi + \frac{\alpha}{4k} \sin k\pi \right) + 1, \quad (13)$$

который уже возникал в соотношении (5). Видно, что матрица имеет собственное ровно одно число по модулю меньшее 1 тогда и только тогда, когда дискриминант положителен, то есть

$$\left| \cos k\pi + \frac{\alpha}{4k} \sin k\pi \right| > 1,$$

и имеет пару комплексно сопряженных собственных чисел с модулем равным 1 тогда и только тогда, когда эта величина не превосходит 1:

$$\left| \cos k\pi + \frac{\alpha}{4k} \sin k\pi \right| \leq 1.$$

В первом случае собственные числа определяются формулой

$$\lambda_{1,2} = \cos k\pi + \frac{\alpha}{4k} \sin k\pi \pm \sqrt{\left(\cos k\pi + \frac{\alpha}{4k} \sin k\pi\right)^2 - 1} \quad (14)$$

и удовлетворяют соотношению  $\lambda_2 = \lambda_1^{-1}$ . Тогда  $\lambda_2 < 1$  получается при  $\cos k\pi + \frac{\alpha}{4k} \sin k\pi < 1$  и  $\lambda_1 < 1$ , если это выражение меньше -1. Соответствующими собственными векторами будут  $v_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{4ik} e^{-ik\pi} \\ \lambda_{1,2} - \left(1 + \frac{\alpha}{4ik}\right) e^{ik\pi} \end{pmatrix}$ .

Дюкло, Экснер и Тюрк в своей статье [6] продолжают изложенные рассуждения и детально исследуют спектр гамильтониана для цепочки с изгибом. Мы же остановимся здесь и подведем итоги обзора их работы.

Итак, мы выяснили, что если задать волновую функцию на каком-нибудь кольце цепочки, которое мы будем называть базовым и проиндексировать 1, то посредством соотношения (12) мы можем определить её и на всей цепочке вообще. Кроме того, эта волновая функция должна удовлетворять условиям (9), (10). Так же установлено, для значений энергии  $E$ , модули которых не являются квадратами натуральных чисел, волновая функция на каждом кольце цепочки должна быть симметрична относительно её оси, что выражается соотношением (11). Далее будем проводить рассуждения именно для таких значений энергии.

Спектральные свойства трансфер-матрицы из соотношения (12) так же накладывают условия на волновую функцию на кольцах всех цепочки. Именно, коэффициенты  $C_j^\pm$  в разложении этой функции на компоненты на верхней (нижней) дуге  $j$ -ого кольца, должны составлять вектор  $(C_1^+; C_1^-)^T$ , который не содержит компоненту, возрастающую при умножении на трансфер-матрицу. В противном случае мы получим волновую функцию уходящую на бесконечность, что не соответствует стационарному состоянию частицы.

## Часть III

# Постановка задачи и её решение

## 3 Система в отсутствии магнитного поля

Итак, сформулируем подробно задачу исследования. В качестве исследуемой модели возьмем квантовый граф  $G$  типа разветвленной цепочки колец. Мы будем представлять его себе как базовое кольцо, к которому присоединены три прямые полубесконечные цепочки.

Рассмотрим схему разветвления figure 4. Три полубесконечные цепочки имеют оси симметрии, отмеченные пунктирными линиями. Их точки контакта с **базовым кольцом**, имеющим индекс 0, обозначены латинскими буквами A, B, C. Углы между осями симметрии обозначены  $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ . На каждой дуге задана волновая функция. Все волновые функции, объединенные в одну составляют волновую функцию квантовой частицы. Стрелками на дугах обозначены направления отсчета координаты вдоль этих дуг. Все кольца имеют единичный радиус и соединены в точках касания. Как и ранее, пространством состояний бесспиновой нерелятивистской частицы, «живущей» на  $G$ , будет  $L^2(G)$ . Будем предполагать систему в отсутствии

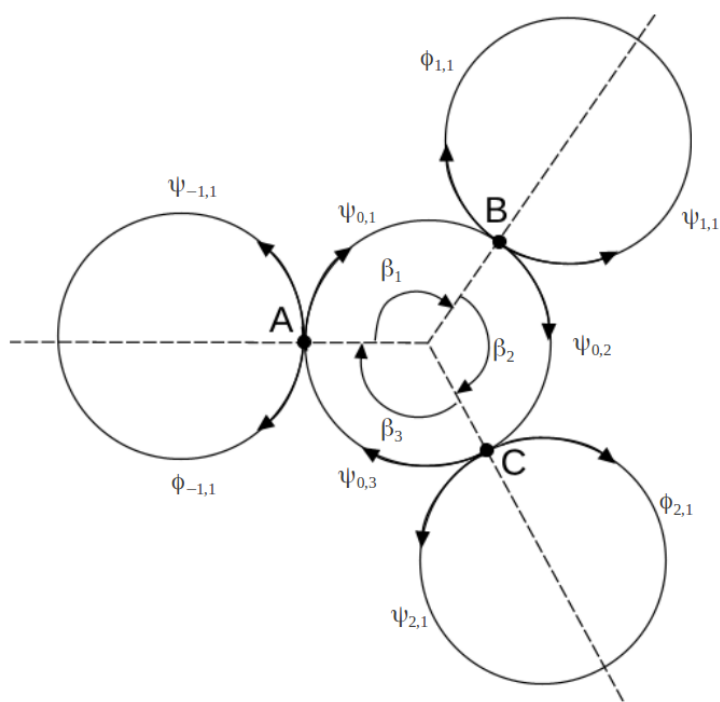


Рис. 4: Схема разветвления

внешних полей. Что бы максимально упростить рассмотрение, выберем такую систему единиц измерения, где физические константы будут равны единице: положим  $\hbar = 2m = 1$ . В местах контакта колец на волновые функции наложим условия  $\delta$ -соединения (1). Определим гамильтониан системы  $H$  как отрицательный лапласиан, действующий как  $\Psi \rightarrow -\frac{d^2}{dx^2}\Psi$  на каждом ребре графа. В область определения гамильтониана  $H$  войдут все функции из  $W_{loc}^{2,2}(G)$ , удовлетворяющие граничным (1) в узлах графа. Для полного описания состояния модели достаточно найти волновые функции на базовом кольце и на трех кольцах, контактирующих с ним. Тогда, пользуясь трансферной матрицей из соотношения (12), мы можем определить волновые функции на всех кольцах системы.

### 3.1 Получение характеристического уравнения

Как и прежде, все компоненты волновой функции с энергией  $k^2$  будут линейными комбинациями  $e^{\pm ikx}$ . Состояние на базовом кольце описывается посредством трех функций  $\psi_{0,1}$ ,  $\psi_{0,2}$ ,  $\psi_{0,3}$ :

$$\begin{aligned}\psi_{0,1} &= A^+ e^{ikx} + A^- e^{-ikx}, & x \in [0, \beta_1] \\ \psi_{0,2} &= B^+ e^{ikx} + B^- e^{-ikx}, & x \in [0, \beta_2] \\ \psi_{0,3} &= C^+ e^{ikx} + C^- e^{-ikx}, & x \in [0, \beta_3]\end{aligned}\tag{15}$$

На кольцах, примыкающих к базовому кольцу в точках А, В, С введем следующие компоненты волновой функции:

$$\begin{aligned}\psi_{m,1} &= C_{m,1}^+ e^{ikx} + C_{m,1}^- e^{-ikx}, & x \in [0, \pi], \\ \phi_{m,1} &= D_{m,1}^+ e^{ikx} + D_{m,1}^- e^{-ikx}, & x \in [0, \pi],\end{aligned}$$

где  $m$  - номер ветви - соответственно равен  $-1, 1, 2$ .

Как было показано ранее, при значениях энергии, модули которых не являются квадратами целых чисел, волновая функция должна быть симметричной на прямых цепочках (ветвях) модели:

$$\psi_{m,j}(x) = \phi_{m,j}(x), \quad x \in [0, \pi],\tag{16}$$

где индекс  $m = -1, 1, 2$  нумерует ветви, а индекс  $j = 1, 2, 3, \dots$  - кольца вдоль каждой из ветвей. Используя условия  $\delta$ -соединения в точках контакта колец, с учетом равенств (16), получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned}\psi_{0,1}(0) &= \psi_{0,3}(\beta_3) = \psi_{-1,1}(0), \\ 2\psi'_{-1,1}(0) - \psi'_{0,3}(\beta_3) + \psi'_{0,1}(0) &= \alpha \cdot \psi_{-1,1}(0), \\ \psi_{0,2}(0) &= \psi_{0,1}(\beta_1) = \psi_{1,1}(0), \\ 2\psi'_{1,1}(0) - \psi'_{0,1}(\beta_1) + \psi'_{0,2}(0) &= \alpha \cdot \psi_{1,1}(0), \\ \psi_{0,3}(0) &= \psi_{0,2}(\beta_2) = \psi_{2,1}(0), \\ 2\psi'_{2,1}(0) - \psi'_{0,2}(\beta_2) + \psi'_{0,3}(0) &= \alpha \cdot \psi_{2,1}(0).\end{aligned}\tag{17}$$

В (2) было показано, что для стационарности состояния необходимо, чтобы компоненты волновой функции на кольцах прямых цепочек описывались собственным вектором трансферной матрицы  $M$  (или их линейной комбинацией), отвечающим собственному числу (числам) не превосходящему 1 по модулю. Далее будем предполагать что на всех кольцах прямых цепочек, волновая функция определяется собственным вектором трансферной матрицы с собственным числом  $\mu$ ,  $|\mu| < 1$ . Это соответствует убыванию модуля волновой функции при удалении от разветвления. В результате получим линейную зависимость между компонентами волновой функции на примыкающих кольцах:

$$\begin{aligned}\psi_{1,1}(x) &= \gamma_1 \cdot \psi_{-1,1}(x), \quad x \in [0, \pi], \\ \psi_{2,1}(x) &= \gamma_2 \cdot \psi_{-1,1}(x), \quad x \in [0, \pi],\end{aligned}$$

где  $\gamma_{1,2} \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ .

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned}\psi_{-1,2}(0) &= u \neq 0, \\ \alpha \psi_{-1,1}(0) - 2\psi'_{-1,1}(0) &= v.\end{aligned}$$

С учетом новых обозначений получаем:

$$\begin{aligned}\psi_{1,1}(0) &= \gamma_1 \cdot \psi_{-1,1}(0) = \gamma_1 \cdot u \\ \psi_{2,1}(0) &= \gamma_2 \cdot \psi_{-1,1}(0) = \gamma_2 \cdot u \\ \alpha \cdot \psi_{1,1} - 2\psi'_{1,1}(0) &= \gamma_1(\alpha \cdot \psi_{-1,1} - 2\psi'_{-1,1}(0)) = \gamma_1 \cdot v \\ \alpha \cdot \psi_{2,1} - 2\psi'_{2,1}(0) &= \gamma_2(\alpha \cdot \psi_{-1,1} - 2\psi'_{-1,1}(0)) = \gamma_2 \cdot v\end{aligned}$$

В результате система уравнений (17) принимает более удобный вид:

$$\begin{aligned}\psi_{0,1}(0) &= \psi_{0,3}(\beta_3) = u, \\ \psi'_{0,1}(0) - \psi'_{0,3}(\beta_3) &= v, \\ \psi_{0,2}(0) &= \psi_{0,1}(\beta_1) = \gamma_1 \cdot v, \\ \psi'_{0,2}(0) - \psi'_{0,1}(\beta_1) &= \gamma_1 \cdot u, \\ \psi_{0,3}(0) &= \psi_{0,2}(\beta_2) = \gamma_2 \cdot v, \\ \psi'_{0,3}(0) - \psi'_{0,2}(\beta_2) &= \gamma_2 \cdot u.\end{aligned} \tag{18}$$

Перейдем к решению системы. Для начала рассмотрим граничные условия для функции  $\psi_{0,1}$ :

$$\begin{aligned}\psi_{0,1}(0) &= u, \\ \psi_{0,1}(\beta_1) &= \gamma_1 \cdot u.\end{aligned}$$

Из них прямо следует равенство:

$$\psi_{0,1}(\beta_1) = \gamma_1 \cdot \psi_{0,1}(0)$$

Подставляя из (15) выражение для  $\psi_{0,1}(x)$ , получаем

$$\begin{aligned} A^+ e^{ik\beta_1} + A^- e^{-ik\beta_1} &= \gamma_1 (A^+ + A^-), \\ A^+ (e^{ik\beta_1} - \gamma_1) + A^- (e^{-ik\beta_1} - \gamma_1) &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Положим здесь и далее

$$\gamma_1 \neq e^{\pm ik\beta_1}.$$

Тогда между коэффициентами  $A^\pm$  возникает связь:

$$A^- = -A^+ \frac{e^{ik\beta_1} - \gamma_1}{e^{-ik\beta_1} - \gamma_1}. \quad (20)$$

Проведем аналогичные рассуждения для решений  $\psi_{0,2}(x)$  и  $\psi_{0,3}(x)$  и получим соотношения для их коэффициентов:

$$B^- = -B^+ \frac{e^{ik\beta_2} - \frac{\gamma_2}{\gamma_1}}{e^{-ik\beta_2} - \frac{\gamma_2}{\gamma_1}}, \quad (21)$$

$$C^- = -C^+ \frac{e^{ik\beta_3} - \frac{1}{\gamma_2}}{e^{-ik\beta_3} - \frac{1}{\gamma_2}}, \quad (22)$$

где наложены аналогичные требования

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} &\neq e^{\pm ik\beta_2}, \\ \gamma_2 &\neq e^{\pm ik\beta_3}. \end{aligned}$$

Далее, подставив (20) в граничное условие:  $\psi_{0,1}(0) = u$ , найдем коэффициент  $A^+$  в виде:

$$A^+ = u \frac{\gamma_1 - e^{-ik\beta_1}}{e^{ik\beta_1} - e^{-ik\beta_1}}. \quad (23)$$

Обратим внимание на то, что для существования правой части требуется

$$\sin k\beta_1 \neq 0$$

. То же самое сделаем для функций  $\psi_{0,2}(x)$  и  $\psi_{0,3}(x)$  и придем к результату

$$\begin{aligned} B^+ &= \gamma_1 \cdot u \cdot \frac{\frac{\gamma_2}{\gamma_1} - e^{-ik\beta_2}}{e^{ik\beta_1} - e^{-ik\beta_2}}, \\ C^+ &= \gamma_2 \cdot u \cdot \frac{\frac{1}{\gamma_2} - e^{-ik\beta_3}}{e^{ik\beta_3} - e^{-ik\beta_3}} \end{aligned}$$

с требованиями

$$\sin k\beta_{2,3} \neq 0.$$

Теперь коэффициенты всех компонент волновой функции на базовом кольце имеют выражения не связанные друг с другом напрямую.

Рассмотрим условия  $\delta$ -соединения первого порядка

$$\begin{aligned}
\psi'_{0,1}(0) - \psi'_{0,3}(\beta_3) &= v \\
\psi'_{0,2}(0) - \psi'_{0,1}(\beta_1) &= \gamma_1 v \\
\psi'_{0,3}(0) - \psi'_{0,2}(\beta_2) &= \gamma_2 v
\end{aligned}$$

Подставив в эти условия выражения для коэффициентов компонент волновой функции на базовом кольце, получим систему уравнений:

$$\begin{aligned}
\frac{\gamma_1}{\sin k\beta_1} + \frac{\gamma_2}{\sin k\beta_3} &= \frac{v}{ku} + \cot k\beta_1 + \cot k\beta_3, \\
\frac{1/\gamma_1}{\sin k\beta_1} + \frac{\gamma_2/\gamma_1}{\sin k\beta_3} &= \frac{v}{ku} + \cot k\beta_1 + \cot k\beta_2, \\
\frac{\gamma_1/\gamma_2}{\sin k\beta_2} + \frac{1/\gamma_2}{\sin k\beta_3} &= \frac{v}{ku} + \cot k\beta_2 + \cot k\beta_3.
\end{aligned} \tag{24}$$

Для краткости введем обозначения

$$\begin{aligned}
R_n &= \frac{1}{\sin k\beta_n}, \\
Q_{m,n} &= \frac{v}{ku} + \cot k\beta_m + \cot k\beta_n,
\end{aligned}$$

$m, n = 1, 2, 3, m \neq n$ . Тогда система (24) запишется в более простом виде

$$\begin{aligned}
\gamma_1 R_1 + \gamma_2 R_3 &= Q_{1,3}, \\
\frac{1}{\gamma_1} R_1 + \frac{\gamma_2}{\gamma_1} R_2 &= Q_{1,2}, \\
\frac{\gamma_1}{\gamma_2} R_2 + \frac{1}{\gamma_2} R_3 &= Q_{2,3}.
\end{aligned} \tag{25}$$

При заданных углах  $\beta_1, \beta_2, \beta_3$  неизвестными в ней являются параметры  $\gamma_1, \gamma_2$  и  $k$ . Решая совместно первое и второе уравнения из (25), получим выражения для параметров  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ :

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \frac{R_1 R_3 + Q_{1,3} R_2}{R_1 R_2 + Q_{1,2} R_3}, \\
\gamma_2 &= \frac{Q_{1,3} Q_{1,2} - R_1^2}{R_1 R_2 + Q_{1,2} R_3},
\end{aligned} \tag{26}$$

в предположении  $R_1 R_2 + Q_{1,2} R_3 \neq 0$ . Если же решить первое и третье уравнения из этой же системы (25), то придем к иным выражениям:

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \frac{Q_{1,3} Q_{2,3} - R_3^2}{R_2 R_3 + Q_{2,3} R_1}, \\
\gamma_2 &= \frac{R_1 R_3 + Q_{1,3} R_2}{R_2 R_3 + Q_{2,3} R_1},
\end{aligned} \tag{27}$$

в предположении  $R_2R_3 + Q_{2,3}R_1 \neq 0$ . Ясно, что выражения в правых частях (26) и (27) должны принимать равные значения, то есть

$$\begin{aligned}\frac{R_1R_3 + Q_{1,3}R_2}{R_1R_2 + Q_{1,2}R_3} &= \frac{Q_{1,3}Q_{2,3} - R_3^2}{R_2R_3 + Q_{2,3}R_1}, \\ \frac{Q_{1,3}Q_{1,2} - R_1^2}{R_1R_2 + Q_{1,2}R_3} &= \frac{R_1R_3 + Q_{1,3}R_2}{R_2R_3 + Q_{2,3}R_1}.\end{aligned}$$

В результате преобразований оба этих уравнения переходят в одно характеристическое уравнение:

$$2R_1R_2R_3 + R_1^2Q_{2,3} + R_2^2Q_{1,3} + R_3^2Q_{1,2} - Q_{1,2}Q_{1,3}Q_{2,3} = 0. \quad (28)$$

Решениям  $k$  этого уравнения, удовлетворяющим введенным ограничениям, будут соответствовать собственные числа  $E = k^2$  гамильтониана частицы. Поскольку в ходе решения задачи было сделано предположения, обеспечивающие существование используемых выражений, то множество решений могло сузиться. Следовательно, исходная система может иметь и другие решения, кроме тех, что даёт уравнение (28). Рассмотрим их в следующем разделе.

### 3.2 Изучение особых случаев

Напомним, что коэффициенты  $A^\pm$  компоненты волновой функции  $\psi_{0,1}(x)$  вычислялись по формулам

$$A^\pm = u \frac{\gamma_1 - e^{\mp ik\beta_1}}{e^{ik\beta_1} - e^{-ik\beta_1}}.$$

При выведении этих соотношений было сделано предположение

$$\gamma_1 \neq e^{\pm ik\beta_1}.$$

Покажем, что в действительности это требование не влияет на решение. Пусть мы имеем  $\gamma_1 = e^{ik\beta_1}$ . Тогда из равенства (19) будет следовать  $A^- = 0$ , а из условия  $\psi_{0,1}(0) = u$  выразим  $A^+ = u$ . То же самое получится, если выражение  $\gamma_1 = e^{ik\beta_1}$  напрямую подставить в (23). Значит без требования  $\gamma_1 \neq e^{ik\beta_1}$  можно обойтись. Проведя те же рассуждения для  $\gamma_1 \neq e^{-ik\beta_1}$ , увидим что выполнение  $\gamma_1 = e^{-ik\beta_1}$  также допустимо. Рассуждая аналогично, откажемся от требований  $\frac{\gamma_2}{\gamma_1} \neq e^{\pm ik\beta_2}$  и  $\gamma_2 \neq e^{\pm ik\beta_3}$ . Определение наличия решений системы (18) в случаях когда  $\sin k\beta_m$ ,  $m = 1, 2, 3, \dots$ ,  $R_1R_2 + Q_{1,2}R_3 = 0$  или  $R_2R_3 + Q_{2,3}R_1 = 0$  достаточно сложно для анализа. Мы не будем здесь их рассматривать.

## 4 Система в магнитном поле

Логическим продолжением исследования разветвленной цепочки колец стало наложение на систему внешнего магнитного поля  $\vec{B}$  действующего перпендикулярно её плоскости (См figure 5). Как известно, магнитное поле



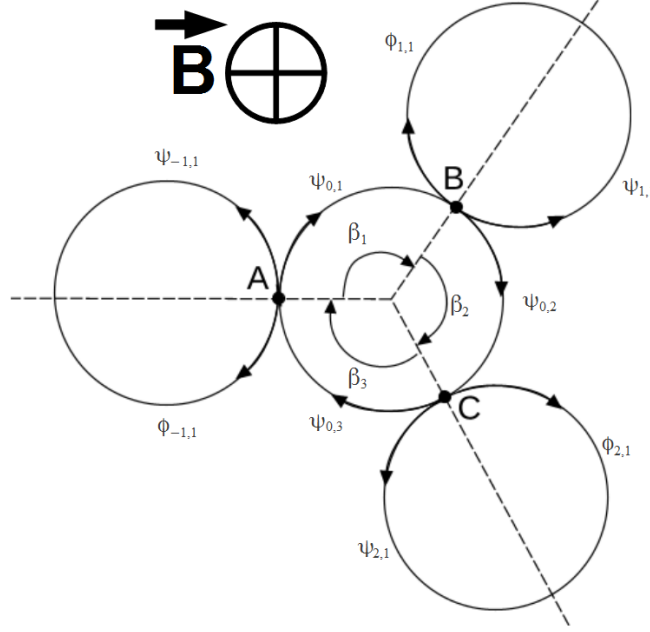


Рис. 5: Разветвление цепочки в магнитном поле

заметно действует на проводники округлой формы. В нашем же рассматриваемая модель вся состоит из соединенных между собой колец, и наличие магнитного поля, действующего перпендикулярно плоскости модели, очевидно проявляется.

Начнем наблюдение влияния магнитного поля с импульса частицы. Как известно, частица, движущаяся по дуге окружности получает “магнитную добавку” в оператор импульса:

$$\hat{p} = \frac{1}{i} \frac{d}{dx} \pm \Phi,$$

где  $\Phi = \frac{\pi B}{\Phi_0}$ , а  $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{|e|}$  - квант магнитного поля. Знак перед  $\Phi$  в выражении для импульса будет разным для по-разному направленных дуг, относительно направления магнитного поля. Для дуг, направленных по часовой стрелке (например, дуги базового кольца) в формуле используется знак “+”, а для дуг, направленных в противоположную сторону, - знак “-”. Это правило мы назовем “правилом знаков”. Дугу, направленную по часовой стрелке, станем называть *положительной дугой*, а направленную в противоположную сторону дугу - *отрицательной*.

Гамильтониан частицы может быть выражен через оператор импульса как  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ , а значит так же претерпит изменения. Мы введем  $\hat{H}_\Phi$  - гамильтониан системы в магнитном поле:

$$\hat{H}_\Phi = -\frac{d^2}{dx^2} \pm \frac{2\Phi}{i} \frac{d}{dx} + \Phi^2,$$

где знак перед оператором однократного дифференцирования выбирается

согласно правилу для знака в операторе импульса. Как и раньше мы рассматриваем стационарную задачу, которая с введением магнитного поля так же преобразуется:

$$\hat{H}_\Phi \psi = E\psi,$$

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} \pm \frac{2\Phi}{i} \frac{d}{dx} + \Phi^2\right)\psi = E\psi.$$

Корни характеристического полинома

$$\chi(\lambda) = -\lambda^2 \mp i2\Phi\lambda + \Phi^2 - E.$$

этого дифференциального уравнения так же получают “магнитную добавку”:

$$\lambda_{1,2} = \mp i\Phi \pm ik,$$

где  $k = \sqrt{E}$ , а знаки перед  $i\Phi$  выбираются по правилу по “противоположному правилу знаков”. Здесь знак “-” - для направленных по часовой, а “+” - для дуг направленных против часовой стрелки соответственно. Магнитная добавка в собственных числах влечет в свою очередь изменение вида решений на дугах:

$$\psi(x) = e^{\mp i\Phi x} (C^+ e^{ikx} + C^- e^{-ikx}).$$

#### 4.1 Прямая цепочка колец в магнитном поле и существенный спектр

Как и в случае системы в отсутствии магнитного поля о существенном спектре модели можно судить по спектральным свойствам прямой цепочки. Первым делом, для получения самосопряженного гамильтониана мы наложим в качестве граничных условий в узлах графа условия дельта соединения equation (9), equation (10). Используя первую группу уравнений equation (9), мы получаем матричную зависимость для коэффициентов решений на дугах одного кольца:

$$\begin{pmatrix} D_j^+ \\ D_j^- \end{pmatrix} = S(k, \Phi) \begin{pmatrix} C_j^+ \\ C_j^- \end{pmatrix},$$

$$S(k, \Phi) = e^{-i\Phi\pi} (e^{ik\pi} - e^{-ik\pi})^{-1} \begin{pmatrix} \{e^{ik\pi} e^{-i\Phi\pi} - e^{-ik\pi} e^{i\Phi\pi}\} & \{e^{-ik\pi} e^{-i\Phi\pi} - e^{-ik\pi} e^{i\Phi\pi}\} \\ \{e^{ik\pi} e^{i\Phi\pi} - e^{ik\pi} e^{-i\Phi\pi}\} & \{e^{ik\pi} e^{i\Phi\pi} - e^{-ik\pi} e^{-i\Phi\pi}\} \end{pmatrix},$$

где коэффициенты решения на *отрицательной* дуге выражены через коэффициенты *положительной*.

##### 4.1.1 Трансфер-матрица в магнитном поле

Применяя сразу обе группы граничных условий equation (9), equation (10), мы приходим к матричной связи решений на *положительных* дугах соседних колец:

$$\begin{pmatrix} C_j^+ \\ C_j^- \end{pmatrix} = M(k, \Phi) \begin{pmatrix} C_{j-1}^+ \\ C_{j-1}^- \end{pmatrix}, \quad j = 2, 3, 4, \dots, \quad (29)$$

где

$$M(k, \Phi) = (e^{-ik\pi} e^{-i\Phi\pi} - e^{ik\pi} e^{i\Phi\pi} - e^{ik\pi} e^{-i\Phi\pi} + e^{-ik\pi} e^{i\Phi\pi})^{-1} \widetilde{M}(k, \Phi)$$

- трансфер-матрица размерности 2х2 системы в магнитном поле, а матрицу  $\widetilde{M}(k, \Phi)$  мы опишем её столбцами:

$$\widetilde{M}(k, \Phi)^{(1)} = \begin{pmatrix} e^{i2\Phi\pi} + e^{-i2\Phi\pi} - 2e^{i2k\pi} + \frac{i\alpha}{2k} (e^{i2k\pi} - 1) \\ 1 - e^{i2k\pi} e^{-i2\Phi\pi} + e^{i2k\pi} - e^{i2\Phi\pi} - \frac{i\alpha}{2k} (e^{i2k\pi} - 1) \end{pmatrix},$$

$$\widetilde{M}(k, \Phi)^{(2)} = \begin{pmatrix} e^{-i2k\pi} e^{-i2\Phi\pi} - 1 - e^{-i2k\pi} + e^{i2\Phi\pi} + \frac{i\alpha}{2k} (1 - e^{-i2k\pi}) \\ 2e^{-i2k\pi} - e^{-i2\Phi\pi} - e^{i2\Phi\pi} - \frac{i\alpha}{2k} (1 - e^{-i2k\pi}) \end{pmatrix}.$$

В целях дальнейшего спектрального анализа трансфер-матрицы оказалось полезно получить следующее ее разложение:

$$M(k, \Phi) = f(k, \Phi) \{T(k, \Phi) + 2(e^{-ik\pi} - e^{ik\pi}) M(k, 0)\}, \quad (30)$$

где

$$f(k, \Phi) = (e^{-i\Phi\pi} + e^{i\Phi\pi})^{-1} (e^{-ik\pi} - e^{ik\pi})^{-1}$$

- функция  $f : \mathbb{C} \otimes \mathbb{C} \mapsto \mathbb{C}$ ,

$$T(k, \Phi) = (e^{i\Phi\pi} - e^{-i\Phi\pi})^2 \tilde{T}(k, \Phi)$$

- функция  $T : \mathbb{C} \otimes \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}_{2 \times 2}$ ,

$$\tilde{T}(k, \Phi) = \begin{pmatrix} \{1\} & \{g(k, \Phi)\} \\ \{-g(-k, \Phi)\} & \{-1\} \end{pmatrix}$$

- вспомогательная матрица-функция  $\tilde{T} : \mathbb{C} \otimes \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}_{2 \times 2}$ ,

$$g(k, \Phi) = \frac{e^{-ik\pi} (e^{ik\pi} e^{i\Phi\pi} - e^{-ik\pi} e^{-i\Phi\pi})}{(e^{i\Phi\pi} - e^{-i\Phi\pi})}$$

- функция  $g : \mathbb{C} \otimes \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ ,

$$M(k, 0) = \begin{pmatrix} \{e^{ik\pi} (1 + \frac{\alpha}{4ik})\} & \{e^{-ik\pi} \frac{\alpha}{4ik}\} \\ \{-e^{ik\pi} \frac{\alpha}{4ik}\} & \{e^{-ik\pi} (1 - \frac{\alpha}{4ik})\} \end{pmatrix}$$

- трансфер-матрица системы в отсутствии магнитного поля. Это разложение особенно ценно тем, что устанавливает связь между трансфер-матрицами систем в магнитном поле и в его отсутствии. Подставляя в него  $\Phi = 0$  можно легко увидеть, что в правой части останется только матрица  $M(k, 0)$ , то есть матричное соотношение equation (29) является обобщением соотношения equation (12) на случай ненулевого магнитного поля.

#### 4.1.2 Спектральный анализ трансфер-матрицы

Теперь, когда у нас появился вид трансфер-матрицы системы в магнитном поле мы можем провести ее спектральный анализ и сделать на его основе заключения о спектре гамильтониана. Двумерная матрица  $M$  имеет два собственных числа (или одно двукратно вырожденное):

$$\lambda_{1,2} = \frac{\text{tr}(M) \pm \sqrt{D(M)}}{2} \quad (31)$$

где  $D(M) = \text{tr}(M)^2 - 4\det(M) = (m_{1,1} - m_{2,2})^2 + 4m_{1,2}m_{2,1}$  - дискриминант ее характеристического полинома.

**Дискриминант трансфер-матрицы.** Дискриминантом матрицы  $2 \times 2$  будем называть дискриминант ее характеристического полинома.

Дискриминант  $D(M)$  является квадратичной формой от матрицы и обладает следующими свойствами:

- 1) Дискриминант от суммы матриц  $A$  и  $B$  есть

$$D(A + B) = D(A) + D(B) + 2d(A, B),$$

где  $d(A, B) = (a_{1,1} - a_{2,2})(b_{1,1} - b_{2,2}) + 2a_{1,2}b_{2,1} + 2b_{1,2}a_{2,1}$ .

- 2) Пусть  $\alpha \in \mathbb{C}$  - комплексная константа,  $C$  - матрица  $2 \times 2$ ,

$$D(\alpha C) = \alpha^2 D(C)$$

Функция же  $d(A, B)$  является билинейной симметричной формой.

Используя указанные выше свойства дискриминанта матрицы найдем его вид для трансфер-матрицы  $M(k, \Phi)$  с учетом её разложения equation (30):

$$D(M(k, \Phi)) = f(k, \Phi)^2 \cdot \left\{ \begin{array}{l} D(T(k, \Phi)) + \\ + 4(e^{-ik\pi} - e^{ik\pi})^2 D(M(k, 0)) + \\ + 4(e^{-ik\pi} - e^{ik\pi}) d(T(k, \Phi), M(k, 0)) \end{array} \right\}.$$

И, наконец, подставив выражения для  $T(k, \Phi)$  и  $M(k, 0)$  получим окончательный вид:

$$D(M(k, \Phi)) = \frac{4}{\cos^2(\Phi\pi)} \left\{ \left( \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right)^2 - 1 \right\}.$$

Легко видеть, что этот дискриминант отличается от дискриминанта случая без магнитного поля множителем  $(\cos\Phi\pi)^{-2}$ .

**След трансфер-матрицы.** Кроме дискриминанта в выражении для собственных чисел трансфер-матрицы также присутствует её след  $\text{tr}(M(k, \Phi))$ . Вооружившись свойством линейности следа, как функции от матрицы, мы приходим к разложению

$$\begin{aligned} \text{tr}(M(k, \Phi)) &= \text{tr}(f(k, \Phi)T(k, \Phi) + f(k, \Phi)2(e^{-ik\pi} - e^{ik\pi})M(k, 0)) = \\ &= f(k, \Phi) \{ \text{tr}(T(k, \Phi)) + 2(e^{-ik\pi} - e^{ik\pi}) \text{tr}(M(k, 0)) \}. \end{aligned}$$

Осталось подставить сюда выражения для  $T(k, \Phi)$  и  $M(k, 0)$  и получить вид следа всей трансфер-матрицы:

$$\text{tr}(M(k, \Phi)) = \frac{2}{\cos(\Phi\pi)} \left( \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right).$$

Если сравнить этот результат со следом трансфер-матрицы в нулевом магнитном поле  $M(k, 0)$ , то можно заметить присутствие дополнительно множителя  $(\cos\Phi\pi)^{-1}$ . Далее мы увидим, что этот множитель проявится и в собственных числах.

**Собственные числа трансфер-матрицы.** Мы уже имеем выражения для следа трансфер-матрицы и её дискриминанта. Таким образом у нас есть всё, что бы выписать окончательный вид её собственных чисел:

$$\lambda_{1,2} = \frac{(\cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi)) \pm \sqrt{(\cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi))^2 - 1}}{\cos(\Phi\pi)}.$$

Как и следовало ожидать, дополнительный множитель  $(\cos\Phi\pi)^{-1}$  отличает его от вида (14).

Для анализа собственных чисел удобно рассматривать два случая: при положительном и не положительном дискриминанте  $\tilde{D} = (\cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi))^2 - 1$ .

**Не положительный дискриминант  $\tilde{D} \leq 0$ .** Если в случае нулевого магнитного поля аналогичное условие на дискриминант характеристического полинома (13) являлось условием непрерывного спектра, то в случае ненулевого магнитного поля это не так. Здесь мы имеем два комплексно сопряженных собственных числа, модули которых равны  $|\cos\Phi\pi|^{-1}$ .

Как мы знаем, число энергии  $E = k^2$  будет принадлежать существенному спектру, если хотя бы одно из собственных чисел соответствующей трансфер матрицы будет иметь модуль равный единице. Это условие можно записать в виде

$$|\lambda_1| = 1 \vee |\lambda_2| = 1 \quad (32)$$

или сокращенно

$$|\lambda_{1,2}| = 1.$$

Легко видеть, что при  $(\cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi))^2 - 1 \leq 0$  и любых значения энергии  $E = k^2$  собственные числа удовлетворяют этому условию, только если  $|\cos\Phi\pi| = 1$ , то есть в случаи целы значений  $\Phi \in \mathbb{Z}$ . В частности при нулевом магнитном поле ( $\Phi=0$ ).

**Положительный дискриминант  $\tilde{D} > 0$ .** Мы уже показали, что присутствующее магнитное поле меняет домножает модули собственных чисел на  $|\cos\Phi\pi|^{-1}$ . В то время как при нулевом магнитном поле условие  $(\cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi))^2 - 1 > 0$  давало лауну в непрерывном спектре, здесь мы получаем серию точек  $E = k^2$  существенного спектра, где  $k$  являются корнями уравнения

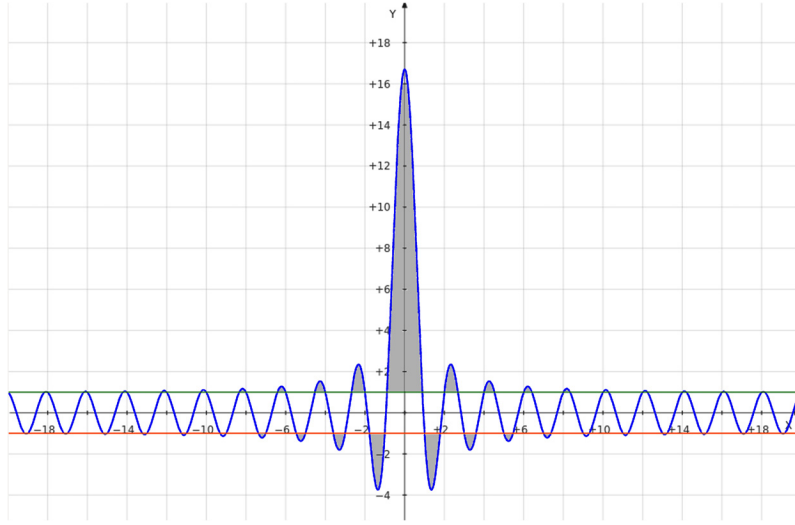


Рис. 6: Функция  $L_\alpha(x)$

$$\cos^2(\Phi\pi) \mp 2 \cos(\Phi\pi) \left( \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right) + 1 = 0 \quad (33)$$

и удовлетворяет неравенству

$$\left( \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right)^2 > 1. \quad (34)$$

В действительности, можно легко показать, что при  $\cos(\Phi\pi) \neq 1$ , для корней уравнения equation (33) условие equation (34) уже выполнено. С ледовательно, при  $\cos(\Phi\pi) \neq 1$ , т.е.  $\Phi \notin \mathbb{Z}$ , всем корням  $k$  уравнения equation (33) будут соответствовать точки существенного спектра  $E = k^2$ .

При  $\cos(\Phi\pi) = 1$  это уравнение принимает вид

$$2 \mp 2 \left( \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right) = 0$$

и, очевидно, не разрешимо при выполненном (34). Это соответствует отсутствию точек существенного спектра в лакунах при нулевом магнитном поле.

**Количество точек существенного спектра.** Элементарными преобразованиями можно показать что уравнение (33) при  $\cos \Phi\pi \neq 0$  эквивалентно следующему

$$\left| \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right| = \left| \frac{\cos^2(\Phi\pi) + 1}{2 \cos(\Phi\pi)} \right|.$$

Для упрощения анализа введем обозначение

$$L_\alpha(k) = \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi).$$

Заметим, что в определении функции  $L_\alpha(k)$  можно выделить косинус:

$$L_\alpha(k) = \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) = \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4k}\right)^2} (\cos(k\pi - \delta_\alpha(k)))$$

где

$$\delta_\alpha(k) = \arcsin \frac{\frac{\alpha}{4k}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4k}\right)^2}}$$

- бесконечно малая величина при  $k$  стремящемся на бесконечность, а множитель  $\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4k}\right)^2}$  стремится к единице справа.

Найдем так же предел в нуле самой функции  $L_\alpha(k)$ :

$$\lim_{k \rightarrow 0} L_\alpha(k) = \lim_{k \rightarrow 0} \left( \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right) = 1 + \frac{\alpha\pi}{4}$$

и до определим её этим значением:

$$L_\alpha(0) = 1 + \frac{\alpha\pi}{4}.$$

Таким образом, функция  $L_\alpha(k)$  будет иметь экстремум в нуле со значением  $1 + \frac{\alpha\pi}{4}$  и серию экстремумов с убывающей амплитудой  $\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4k}\right)^2}$  в точках

$$\cos(k\pi - \delta_\alpha(k)) = \pm 1 \quad (35)$$

На графике figure 6, построенном при положительном  $\alpha$ , можно проследить поведение функции  $L_\alpha(k)$ . Горизонтальные линии около оси абсцисс соответствуют значениям

$$y = \pm \frac{\cos^2(\Phi\pi) + 1}{2 \cos(\Phi\pi)}. \quad (36)$$

Абсциссы пересечения графика функции  $L_\alpha(k)$  и горизонталей (36) являются корнями уравнения (33). Видно, что вследствие затухания амплитуд экстремумов  $L_\alpha(k)$  количество этих корней, а значит и точек вещественного спектра, будет ограничено при фиксированном значении  $\Phi$ .

Давайте теперь зададимся вопросом наличия точек существенного спектра, порождаемых уравнением (33). Пользуясь четностью функции  $L_\alpha(k)$  будем проводить рассуждения только для положительных  $k$ .

При положительном  $\alpha$  неравенство  $L_\alpha(0) = 1 + \frac{\alpha\pi}{4} > \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4k}\right)^2}$  эквивалентно условию для  $k$

$$k > \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha\pi(8 + \alpha\pi)}},$$

которое с достоверностью выполняется уже при  $k > \frac{1}{\pi}$ . В то время как, ввиду положительности смещения  $\delta_\alpha(k)$ , абсцисса первого экстремума (35) справа от нуля уже удовлетворит этому условию. Это означает, что при  $\alpha > 0$  амплитуда экстремума в нуле ( $L_\alpha(0)$ ) амплитуды всех остальных экстремумов, и именно ей и будет определяться наличие корней. В общем же случаи  $\alpha \neq 0$  наличие корней у уравнения (33) гарантируется выполнением условия  $|L_\alpha(0)| > \left| \frac{\cos^2(\Phi\pi) + 1}{2 \cos(\Phi\pi)} \right|$

**Лемма 1.** При  $\Phi \notin \mathbb{Z}$  и  $\alpha \neq 0$  условие

$$\left| 1 + \frac{\alpha\pi}{4} \right| > \left| \frac{\cos^2(\Phi\pi) + 1}{2 \cos(\Phi\pi)} \right|$$

обеспечивает наличие в существенном спектре гамильтониана системы по крайней мере двух точек  $E = k^2$ , где  $k$  являются решениями уравнения (33).

Сколько же точек вещественного спектра получится при заданном значении магнитного поля? Для выяснения этого вопроса введем обозначение

$$g(\Phi) = \frac{\cos^2(\Phi\pi) + 1}{2 \cos(\Phi\pi)}$$

и обратимся к условию возникновения корней около произвольного экстремума:

$$|L_\alpha(k)| = \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4k}\right)^2} > \left| \frac{\cos^2(\Phi\pi) + 1}{2 \cos(\Phi\pi)} \right| = |g(\Phi)|.$$

Это неравенство при  $\cos(\Phi\pi) \neq 0$  эквивалентно следующему:

$$|k| < \frac{|\alpha|}{2} \frac{|\cos(\Phi\pi)|}{1 - \cos^2(\Phi\pi)}. \quad (37)$$

Теперь осталось только выяснить, сколько точек экстремума  $L_\alpha(k)$  укладывается интервал, заданный этим неравенством. Как мы уже установили, эти точки экстремума описываются уравнением  $\cos(k_{ex}\pi - \delta_\alpha(k_{ex})) = 1$ , которое можно записать в виде

$$k_{ex} = n + \frac{\delta_\alpha(k_{ex})}{\pi}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (38)$$

где  $\delta_\alpha(k_{ex}) = \arcsin \frac{\frac{\alpha}{4k}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4k}\right)^2}} \in \left[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}\right]$ . Подставив выражение (38) в (37), приходим к условию

$$-\frac{|\alpha|}{2} \frac{|\cos(\Phi\pi)|}{1 - \cos^2(\Phi\pi)} - \frac{\delta_\alpha}{\pi} < n < \frac{|\alpha|}{2} \frac{|\cos(\Phi\pi)|}{1 - \cos^2(\Phi\pi)} - \frac{\delta_\alpha}{\pi}$$

Благодаря ограниченности величины  $\delta_\alpha$ , количество точек экстремума функции  $L_\alpha(k)$ , удовлетворяющих (37), можно оценить сверху и снизу. Таким образом, количество точек существенного спектра гамильтониана можно ограничить снизу значением

$$4 \left\lfloor \frac{|\alpha|}{2} \frac{|\cos(\Phi\pi)|}{1 - \cos^2(\Phi\pi)} - \frac{1}{2} \right\rfloor,$$

а сверху - значением

$$4 \left\lceil \frac{|\alpha|}{2} \frac{|\cos(\Phi\pi)|}{1 - \cos^2(\Phi\pi)} + \frac{1}{2} \right\rceil.$$

Наконец, мы можем сформировать результаты всех наших рассуждений о существенном спектре разветвления цепочки колец в следующую теорему.



**Теорема 2.** Если магнитное поле  $B$ , действующее перпендикулярно плоскости системы таково что значение  $\Phi = \frac{\pi B}{\Phi_0}$  является целым числом, то существенный спектр гамильтониана системы совпадает с тем, что возникает в отсутствии магнитного поля и описан в теореме 1.

Если же значение  $\Phi = \frac{\pi B}{\Phi_0}$  вещественно, но не является ни целым, ни полуцелым числом, то существенный спектр состоит из отдельных точек  $E = k^2$ , где  $k$  являются корнями уравнения

$$\cos^2(\Phi\pi) \mp 2 \cos(\Phi\pi) \left( \cos(k\pi) + \frac{\alpha}{4k} \sin(k\pi) \right) + 1 = 0.$$

Таких точек будет как минимум две при условии

$$\left| 1 + \frac{\alpha\pi}{4} \right| > \left| \frac{\cos^2(\Phi\pi)+1}{2 \cos(\Phi\pi)} \right|.$$

Кроме того, если это условие выполнено, то количество этих точек можно оценить снизу числом

$$4 \left[ \frac{|\alpha|}{2} \frac{|\cos(\Phi\pi)|}{1 - \cos^2(\Phi\pi)} - \frac{1}{2} \right]$$

и с верху числом

$$4 \left[ \frac{|\alpha|}{2} \frac{|\cos(\Phi\pi)|}{1 - \cos^2(\Phi\pi)} + \frac{1}{2} \right].$$

## Часть IV

# Заключение

Работа была посвящена решению спектральной задачи для квантового графа типа цепочки колец с разветвлением в магнитном. Рассматриваемая модель является грубым приближением для разветвления полосы графена.

В ходе исследования было характеристическое уравнение на спектр модели в отсутствии магнитного поля. Так же проведен анализ существенного спектра этой же системы в магнитном поле.

## Список литературы

- [1] P.Kuchment. J. Phys. A: Math. Gen. 38 (2005) 4887.
- [2] P.Exner, J.P.Keating, P.Kuchment, T.Sunada, A.Teplyaev (Eds.). On Graphs.
- [3] N.I.Gerasimenko, B.S.Pavlov. Teor. Mat. Fiz. 74 (1988) 345.
- [4] M.Aizenman, J.H.Schenker. Lett. Math. Phys. 53 (2000) 253.
- [5] J.Bruning, V.A.Geyler, I.S.Lobanov. Math. Notes. 77 (6) (2005) 932.
- [6] P.Duclos, P.Exner, O.Turek. J. Phys. A: Math. Theor. 41 (2008) 415206.

- [7] P.Duclos, P.Exner. Rev. Math. Phys. 7 (1995) 73.
- [8] I.Yu.Popov. Phys. Lett. A. 269 (2000) 148.
- [9] E.S.Trifanova. Pisma v Zh. Tech. Fyz. 35 (4) (2009) 60.
- [10] P.Kurasov, J.Larsen. J.Math.Anal.Appl. 266 (2002) 127.
- [11] E.Korotyaev: Commun. Math.Phys. 213 (2000) 471.