УДК 517.938

Спектр и собственные функции явнорешаемой модели цепочки колец с перемычками в магнитном поле*

Костров О. Г., Полякина Н. М.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

В работе рассмотрен бесконечный одномерный периодический граф Γ на плоскости, элементарная ячейка которого содержит два кольца, соединённые друг с другом контактами и дуговыми перемычками (смотри рис. 1). В работах [1, 2] ранее рассматривались спектральные свойства бесконечной одномерной цепочки колец, соединённых δ-контактами, без магнитного поля и в присутствии магнитного поля. В работе [3] был рассмотрен квантовый транспорт через граф, состоящий из такой ячейки и двух присоединённых к ней проводников. В ней было показано, что при некоторых значениях потока Φ магнитного поля, перпендикулярного плоскости такого графа и сосредоточенного только в окрестности дуг T, V, коэффициент прохождения системы равен нулю независимо от квазиимпульса k.

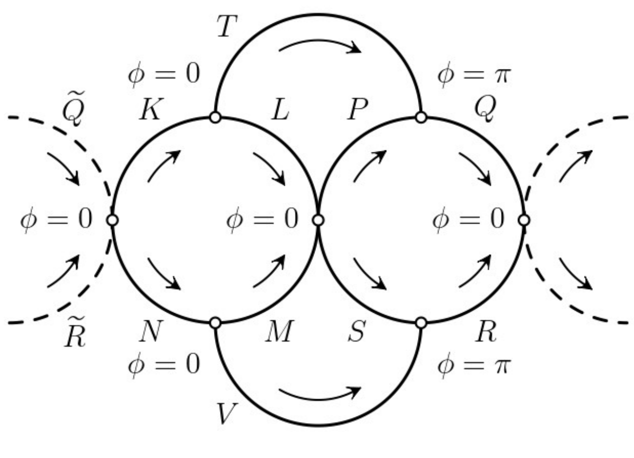

Рис. 1. Элементарная ячейка графа Γ.

Гамильтониан, заданный на элементарной ячейке графа Γ, равен прямой сумме

$$H = H_K \oplus H_L \oplus_M \oplus H_N \oplus H_P \oplus H_Q \oplus H_R \oplus H_S \oplus H_T \oplus H_V,$$

где K, L, M, N, P, Q, R, S, T и V – дуги одинакового радиуса r, $H_X = -d^2/d\phi^2$ – гамильтониан на любой дуге X, кроме дуг T, V, $H_T = H_V = (-id/d\phi + \Phi)^2$ – гамильтонианы на дугах T, V и значение Φ есть поток перпендикулярного плоскости графа Γ магнитного поля, сосредоточенного в окрестности дуг T, V (смотри рис. 1). Для простоты здесь выбрана система единиц, в которой $2m = e = c = \hbar = r = 1$, где m, e – масса и заряд электрона, c – скорость света, $\hbar$ – постоянная Планка.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Республики Мордовия в рамках научного проекта №18-41-130004.

Состояния движущегося электрона, определённые на графе Γ, будут описываться функцией вида $\Psi(\phi) = C^{+}e^{ik\phi} + C^{-}e^{-ik\phi}$, где k – квазиимпульс, угол ϕ изменяется на дугах K, N, P, S от 0 до $\pi/2$, на дугах L, M, Q, R – от $-\pi/2$ до 0 и на дугах T, V – от 0 до π (на рис. 1 стрелками указаны направления увеличения параметра ϕ).

В каждой точке контакта дуг на функцию $\Psi(\phi)$ наложены условия "δ-соединения": 1) предельные значения функций для различных дуг равны между собой; 2) сумма предельных значений производных функций для различных дуг пропорциональна значению функций (если переменная на дуге возрастает при выходе из точки контакта, то перед производной ставится знак "+", и если переменная на дуге убывает при выходе из точки контакта, то перед производной ставится знак "−"). Так, в центральной точке ячейки такие условия имеют вид

$$\Psi_L(0)=\Psi_M(0)=\Psi_P(0)=\Psi_S(0), \quad -\Psi'_L(0)-\Psi'_M(0)+\Psi'_P(0)+\Psi'_S(0)=\alpha\Psi_L(0),$$

где α – коэффициент пропорциональности. Для описания состояний, распространённых вдоль графа Γ, на функцию $\Psi(\phi)$ также дополнительно наложены так называемые условия Флоке

$$\Psi_{\tilde{Q}}(-0)=e^{i\theta}\Psi_Q(-0), \qquad \Psi_{\tilde{R}}(-0)=e^{i\theta}\Psi_R(-0),$$

$$\Psi'_{\tilde{Q}}(-0)=e^{i\theta}\Psi'_Q(-0), \qquad \Psi'_{\tilde{R}}(-0)=e^{i\theta}\Psi'_R(-0),$$

где дуги $\tilde{Q}$ и $\tilde{R}$ – дуги, принадлежащие соседней элементарной ячейке графа Γ и соединённые с дугами K и N (смотри рис. 1). Тогда задача описания собственных функций, распространённых вдоль графа Γ, сводится к задаче на элементарной ячейке графа Γ. В результате получается однородная линейная система из 20 уравнений с 20 неизвестными – коэффициентами функции $\Psi(\phi)$ на каждой из 10 дуг, которая, как известно, имеет ненулевое решение лишь когда определитель системы равен нулю (назовем это равенство *характеристическим уравнением*).

С помощью системы символьных вычислений Mathematica 8.0 при некоторых значениях потока магнитного поля Φ найдено и численно исследовано выражение для характеристического уравнения, определяющее возможные значения фазового множителя $e^{i\theta}$, для которых существуют собственные функции, распространённые вдоль графа Γ.

При $\alpha=\Phi=0$ характеристическое уравнение имеет вид $\cos\theta=(9\cos 2\pi k-1)/8$, откуда следует, что $\theta=\arccos((9\cos 2\pi k-1)/8)$, то есть допустимые значения θ существуют при условии выполнения неравенства $n-\arccos(-7/9)/(2\pi)\leqslant k\leqslant n+\arccos(-7/9)/(2\pi)$, где $n\in\mathbb{Z}$, поэтому характеристическое уравнение определяет зонный спектр оператора H для собственных функций, распространённых вдоль графа Γ. Найденные значения для коэффициентов собственных функций имеют громоздкие выражения, поэтому их не приводим. Заметим, что для них справедливы равенства $C_K^+=C_N^+$, $C_K^-=C_N^-$, $C_T^+=C_V^+$, $C_T^-=C_V^-$, $C_L^+=C_M^+=C_P^+=C_S^+$, $C_L^-=C_M^-=C_P^-=C_S^-$, $C_Q^+=C_R^+$, $C_Q^-=C_R^-$. На рис. 2 изображен график характеристического уравнения $y(k)=\cos\theta$, где $y(k)=(9\cos 2\pi k-1)/8$, а также интервалы зонного спектра на оси Ok, для которых существуют собственные функции, распространённые вдоль графа Γ.

При $\alpha=0$ и $\Phi=2n$, где $n\in\mathbb{Z}$, характеристическое уравнение имеет такой же вид.

При $\alpha\neq 0$ и $\Phi=0$ характеристическое уравнение имеет вид

$$32k^3\cos\theta\,(\alpha\sin(\pi k/2)+8k\cos(\pi k/2))=\cos(5\pi k/2)\left(\alpha^4+144k^4-73\alpha^2k^2\right)-$$

$$-14\sin(5\pi k/2)\left(\alpha^3k-12\alpha k^3\right)+3\cos(3\pi k/2)\left(-\alpha^4+48k^4+\alpha^2k^2\right)+$$

$$+3\sin(3\pi k/2)\left(40\alpha k^3+6\alpha^3k\right)+2\cos(\pi k/2)\left(\alpha^4-16k^4+35\alpha^2k^2\right)-16\sin(\pi k/2)\left(\alpha k^3-\alpha^3\right).$$

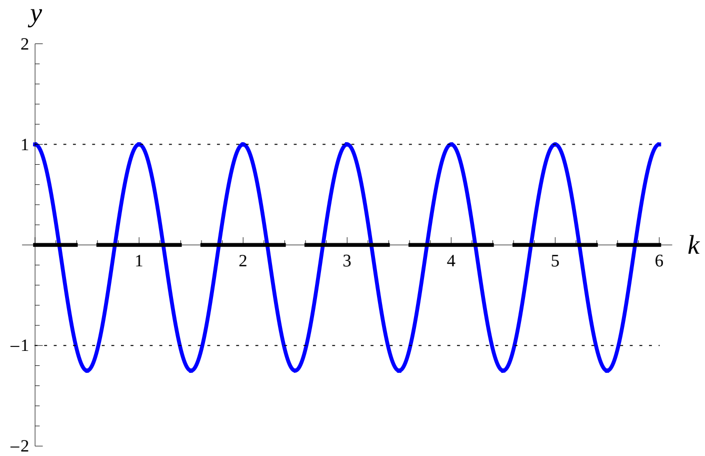

Рис. 2. График функции $y(k) = \cos\theta$ при $\Phi = \alpha = 0$.

На рис. 3 изображен график характеристического уравнения при $\alpha = 1.5$. На графике видно, что зоны спектра на числовой оси k разделились на две подзоны, при этом появились запрещенные значения k — решения уравнения $\alpha\sin(\pi k/2) + 8k\cos(\pi k/2) = 0$.

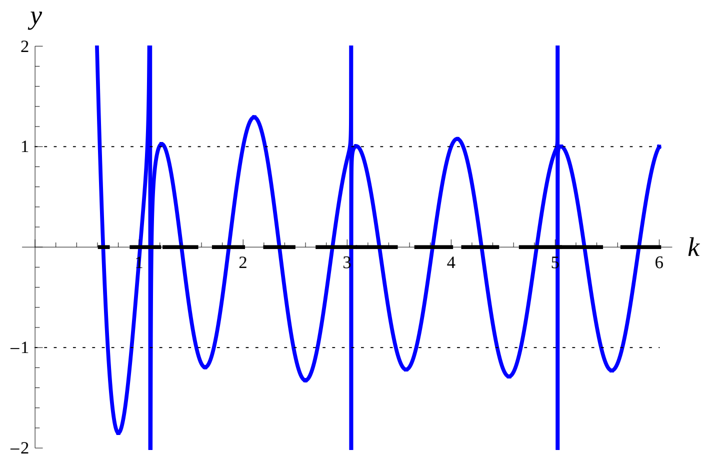

Рис. 3. График функции $y(k) = \cos\theta$ при $\Phi = 0$, $\alpha = 1.5$.

При $\alpha = 0$ и $\Phi = 2n+1$, $n \in \mathbb{Z}$, характеристическое уравнение имеет вид $3\cos(3\pi k/2) + \cos(\pi k/2) = 0$, то есть оно не зависит от параметра θ. Это означает, что решения этого уравнения $k = 2m-1$, где $m \in \mathbb{N}$ и $k = \pm(2/\pi)\arccos\big(\pm\sqrt{2/3}\big) + 4m$, где $m \in \mathbb{N}$, являются точками дискретного спектра, отвечающего собственным функциям, распространённым вдоль графа Г. В результате работы найдены выражения для этих собственных функций. Например, для $k = 2m-1$ собственная функция имеет вид

$$\Psi_K(\phi) = \Psi_N(\phi) = 2\cos((2m+1)\phi),$$

$$\Psi_P(\phi) = \Psi_S(\phi) = \Psi_L(\phi) = \Psi_M(\phi) = -2e^{-i\theta/2}\cos((2m+1)\phi)\cos(\theta/2),$$

$$\Psi_T(\phi) = \Psi_V(\phi) = 2e^{-i((\theta+\pi)/2+31\phi)}\sin((2m+1)\phi)\sin(\theta/2),$$

$$\Psi_R(\phi) = \Psi_Q(\phi) = 2e^{-i\theta}\cos((2m+1)\phi).$$

Литература

1. Duclos P., Exner P., Turek O. On the spectrum of a bent chain graph. Journal of Physics A Mathematical and Theoretical. 41. 2008. 415206 (18 pp).

2. Exner P., Manko S. Spectral properties of magnetic chain graphs. Annales Henri Poincare. 2017. vol. 18, No. 3. pp. 929-953.

3. Еремин Д. А., Костров О. Г., Якунина А. Д. Математическая модель квантового графа, состоящего из двух колец с двумя перемычками // Материалы XI Всероссийской научной конференции с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи» (27–30 мая 2019 г. Самара, Россия) : в 2-х томах. Т. 1 / под ред. В.П. Радченко. Самара : СамГТУ, 2019. С. 271-273.

MSC2020 46N50

Spectrum and eigenfunctions of an explicitly solvable model of a chain of rings with jumpers in a magnetic field

O. G.Kostrov, N. M. Polyakina
National Research Mordovia State University