УДК 517.958: 530.145.6

© *Л. Е. Морозова*

ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ ДЛЯ ДИСКРЕТНОГО ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА С «РЕЗОНАНСНЫМ» ПОТЕНЦИАЛОМ НА ГРАФЕ

Рассматривается дискретный оператор Шредингера на графе, являющийся гамильтонианом электрона, в приближении сильной связи в системе, состоящей из квантовой проволоки и двух внедренных квантовых точек. Данный оператор описывает двухбарьерную резонансную наноструктуру, причем один из барьеров представляет собой нелокальный потенциал. Описан существенный и абсолютно непрерывный спектр оператора. Изучается задача рассеяния в стационарной постановке для двух возможных направлений распространения частицы. Найдены условия полного отражения и полного прохождения.

Ключевые слова: дискретный оператор Шредингера, спектр, уравнение Липпмана–Швингера, задача рассеяния, квантовая точка.

Введение

Мезоскопические устройства (такие как квантовые контакты, квантовые точки, квантовые проволоки) и свойства электронного транспорта через такие структуры изучаются во многих физических работах (см., напр., [1–4]). При этом гамильтониан в таких задачах часто представляет собой в конечно-разностном приближении или в приближении сильной связи разностный оператор Шредингера, область определений которого состоит из функций, заданных на узлах (вершинах) графа. Различные участки графа задают, например, квантовую точку или проволоку.

Несмотря на физическую актуальность этих задач, математически подобные модели изучены недостаточно, и цель данной работы — в какой-то степени восполнить этот пробел.

Положим $\Gamma = \{(n,0) : n \in \mathbb{Z}\} \cup \{(0,1)\}$ — множество вершин графа. Введем в рассмотрение оператор $H_0 : l^2(\mathbb{Z}) \to l^2(\mathbb{Z})$, определенный равенствами

$$\begin{aligned}
&(H\psi)(n,0) = \psi(n+1,0) + \psi(n-1,0), \qquad n \leqslant 1, \quad n \geqslant 2,\\
&(H\psi)(0,0) = \psi(-1,0) + \omega\psi(0,1),\\
&(H\psi)(0,1) = \omega[\psi(0,0) + \psi(1,0)],\\
&(H\psi)(1,0) = \omega\psi(0,1) + \psi(2,0),
\end{aligned} \tag{1}$$

где $\omega \neq 0$ — вещественное число.

Положим $H_V = H+V$, где V — оператор (потенциал) умножения на вещественную функцию $V(n) = V\delta_{nn_0}$, δ_{nn_0} — символ Кронекера, $n, n_0 \in \mathbb{Z}$. Оператор H_V является ограниченным и самосопряженным.

В соответствии со сказанным выше оператор H_V является гамильтонианом квантовой частицы (электрона), находящейся в системе, состоящей из квантовой проволоки и двух квантовых точек, описываемых тремя последними уравнениями в (1) и потенциалом V.

Следует заметить, что оператор H_V описывает «двухбарьерную» резонансную структуру. Нестандартность ситуации состоит в том, что барьер, описываемый уравнениями (1), представляет собой «нелокальный» потенциал (матрицу), что создает сильную ассимметрию оператора.

В настоящей работе, помимо общих спектральных свойств, изучается задача рассеяния в стационарной постановке. Исследованы коэффициенты прохождения и отражения. Найдены условия полного отражения и полного прохождения. При этом, в отличие от одномерного оператора Шредингера с «локальным» потенциалом (оператором умножения на функцию), вероятности прохождения и отражения меняются при изменении направления движения налетающей частицы. Изложенная методика позволяет исследовать широкий класс моделей такого рода.

§ 1. Спектр оператора H

Введем оператор H_0, действуйщий в $l^2(\mathbb{Z})$, по формуле

$$(H_0\psi)(n) = \psi(n-1) + \psi(n+1).$$

Спектр оператора H_0 совпадает с отрезком $[-2,2]$ (см. [5]). Через $R_0(\lambda) = (H_0-\lambda)^{-1}$ обозначим резольвенту оператора H_0. Ядро $G_0(n,m,\lambda)$ этой резольвенты (функция Грина), продолженное по параметру λ на интервал $(-2,2)$, имеет вид (см. [6])

$$G_0(n,m,\lambda) = -\frac{1}{\sqrt{\lambda^2-4}}\left(\frac{\lambda-\sqrt{\lambda^2-4}}{2}\right)^{|n-m|}, \quad n,m\in\mathbb{Z}.$$

Заметим, что функция $g(\lambda) = \lambda/2 - \sqrt{(\lambda/2)^2-1}$ является обратной функцией к функции Жуковского $w = \frac{1}{2}(z+\frac{1}{z})$ для $z = \lambda/2$. Риманова поверхность $\mathcal{M}$ функции $g(\lambda)$ двулистна. Ее листы склеиваются вдоль интервала $(-2,2)$, а точки ± 2 являются точками ветвления. Функция $G_0(n,m,\lambda)$ аналитически продолжается на второй лист поверхности $\mathcal{M}$.

Определим θ равенствами

$$\cos\theta = \frac{\lambda}{2}, \quad \sin\theta = -\sqrt{1-\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2},$$

при этом $\theta\in(-\pi,0)$ или $\theta\in(0,\pi)$. Тогда функция $G_0(n,m,\lambda)$ имеет вид

$$G_0(n,m,\theta) = -\frac{1}{2i\sin\theta}e^{i\theta|n-m|}.$$

Теорема 1. *Существенный спектр оператора H совпадает с отрезком* $[-2,2]$.

Д о к а з а т е л ь с т в о аналогично доказательству теоремы 1 [7]. □

Функции $\psi = \psi(n,m)$, определенные на Γ, будем отождествлять с парами функций (ψ_1,ψ_2), где функция $\psi_1 = \psi_1(n)$ определена на $\mathbb{Z}$, а функция (фактически число) $\psi_2 = \psi_2(1)$ — в точке $m = 1$.

Обозначим

$$F_1(\varphi) = (R_0(\lambda)\varphi)(1) + (R_0(\lambda)\varphi)(0), \quad F_2(\varphi) = (R_0(\lambda)\varphi)(0) + (R_0(\lambda)\varphi)(-1).$$

Вычислим резольвенту $R(\lambda)$ оператора H, для чего решим уравнение

$$(H-\lambda)\psi = \varphi, \quad \varphi\in l^2(\Gamma)$$

относительно ψ для $\lambda\notin[-2,2]$. Учитывая (1), это уравнение можно записать в виде системы уравнений:

$$\begin{cases} [(H_0-\lambda)\psi_1](n) + [\omega\psi_2(1)-\psi_1(1)]\delta_{n0}(n) + [\omega\psi_2(1)-\psi_1(0)]\delta_{n1}(n) = \varphi_1(n), \\ \omega[\psi_1(0)+\psi_1(1)] - \lambda\psi_2(1) = \varphi_2(1). \end{cases} \tag{2}$$

Подействовав оператором $R_0(\lambda)$ на обе части первого уравнения системы (2), получим

$$\begin{cases} \psi_1(n) = (R(\lambda)\varphi)_1(n) = -[\omega\psi_2(1)-\psi_1(1)]\big(R_0(\lambda)\delta_{n0}\big)(n) - \\ \qquad - [\omega\psi_2(1)-\psi_1(0)]\big(R_0(\lambda)\delta_{n1}\big)(n) + \big(R_0(\lambda)\varphi_1\big)(n), \\ \psi_2(1) = (R(\lambda)\varphi)_2(1) = \dfrac{1}{\lambda}\big(\omega[\psi_1(0)+\psi_1(1)] - \varphi_2(1)\big). \end{cases} \tag{3}$$

Отсюда получаем систему относительно $\omega\psi_2(1)-\psi_1(1),\ \omega\psi_2(1)-\psi_1(0)$:

$$\begin{cases} \big(1+\frac{\omega^2}{\lambda}F_1(\delta)-(R_0(\lambda)\delta)(1)\big)[\omega\psi_2(1)-\psi_1(1)]+\big(\frac{\omega^2}{\lambda}F_2(\delta)-(R_0(\lambda)\delta)(0)\big)[\omega\psi_2(1)-\psi_1(0)]= \\ \qquad =\frac{\omega^2}{\lambda}F_1(\varphi_1)-\frac{\omega}{\lambda}\varphi_2(1)-(R_0(\lambda)\varphi_1)(1), \\ \big(\frac{\omega^2}{\lambda}F_1(\delta)-(R_0(\lambda)\delta)(0)\big)[\omega\psi_2(1)-\psi_1(1)]+\big(1+\frac{\omega^2}{\lambda}F_2(\delta)-(R_0(\lambda)\delta)(-1)\big)[\omega\psi_2(1)-\psi_1(0)]= \\ \qquad =\frac{\omega^2}{\lambda}F_1(\varphi_1)-\frac{\omega}{\lambda}\varphi_2(1)-(R_0(\lambda)\varphi_1)(0). \end{cases}$$

Вычисления показывают, что определитель данной системы для $\lambda\in(-2,2)$, $\lambda\neq 0$ пропорционален выражению

$$f(\lambda)=\frac{\lambda}{2}(\lambda^2-3)-i\sqrt{4-\lambda^2}\Big(\omega^2(1+\frac{\lambda}{2})-\frac{\lambda}{2}\Big).$$

Далее, если $f(\lambda)\neq 0$, применяя формулы Крамера к данной системе, получаем резольвенту $R(\lambda)$ оператора H.

Определение 1. *Квазиуровнем* оператора H назовем полюс функции Грина (ядра резольвенты) оператора H (см. [8]) относительно параметра λ.

Заметим, что квазиуровни оператора H, которые легко находятся из уравнения $f(\lambda)=0$, образуют множество $\mathcal{K}=\{0,\pm\sqrt{3}\}$ в случае $\omega=\pm\sqrt{\frac{3}{2\pm\sqrt{3}}}$, и $\mathcal{K}=\{0\}$ в случае, если $\omega\neq\pm\sqrt{\frac{3}{2\pm\sqrt{3}}}$.

Теорема 2. *Множество $[-2,2]\backslash\mathcal{K}$ принадлежит абсолютно непрерывному спектру оператора H.*

Д о к а з а т е л ь с т в о аналогично доказательству теоремы 4 [9]. □

§ 2. Рассеяние

Уравнение Липпмана–Швингера для оператора H_V с налетающей волной, распространяющейся вдоль $\mathbb{Z}$, запишем согласно (3) в виде (для краткости полагаем, что $R_0(\theta)=R_0(\lambda)$)

$$\begin{cases} \psi_1(n)=e^{\pm i\theta n}-[\omega\psi_2(1)-\psi_1(1)]\big(R_0(\theta)\delta_{n0}\big)(n)-[\omega\psi_2(1)-\psi_1(1)]\big(R_0(\theta)\delta_{n1}\big)(n)- \\ \qquad -V\psi_1(n_0)(R_0(\theta)\delta_{n_0n})(n), \\ \psi_2(1)=\frac{1}{2\cos\theta}\big(\omega[\psi_1(0)+\psi_1(1)]\big). \end{cases}, \qquad (4)$$

при этом выбор знака $\lambda+i0$ и $\lambda-i0$ отвечает $\theta\in(-\pi,0)$ и $\theta\in(0,\pi)$ соответственно (это следует из свойств обратной функции к функции Жуковского $g(\lambda)$).

Знак «+» в показателе экспоненты первого уравнения системы (4) соответствует волне, налетающей слева, а знак «−» волне, налетающей справа (см. [10]).

Обозначим $a_-(\theta,\omega)$, $a_+(\theta,\omega)$ коэффициенты отражения и прохождения, соответственно. Тогда $|a_-(\theta,\omega)|^2$ является вероятностью отражения $P_-(\theta,\omega)$ в точке $\theta\in(-\pi,\pi)$, $\theta\neq 0$, а $|a_-(\theta,\omega)|^2$ – вероятностью прохождения в этой же точке (это можно доказать как и в [10]).

Для волны, налетающей слева, справедлива следующая

Лемма 1. *Имеют место формулы*

$$a_-(\theta,\omega)=\frac{Ve^{2i\theta n_0}(\omega^2-\cos\theta e^{i\theta})+(2i\sin\theta+V)\cos\theta e^{i\theta}(1-\omega^2)}{Ve^{2i\theta n_0}e^{-i\theta}\cos\theta(1-\omega^2)+(2i\sin\theta+V)(\omega^2-\cos\theta e^{-i\theta})},$$

$$a_+(\theta,\omega)=-\frac{2\omega^2\sin^2\theta e^{2i\theta n_0}}{Ve^{2i\theta n_0}e^{-i\theta}\cos\theta(1-\omega^2)+(2i\sin\theta+V)(\omega^2-\cos\theta e^{-i\theta})}.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из уравнения Липпмана–Швингера (4) для $n \leqslant n_0$, $n < 0$ имеем

$$\psi_1(n) = e^{i\theta n} + a_-(\theta,\omega)e^{-i\theta n}, \qquad \text{где}$$
$$a_-(\theta,\omega) = \frac{1}{2i\sin\theta}\big[-\omega^2\psi_2(1)(1+e^{i\theta}) + \psi_1(1) + \psi_1(0)e^{i\theta} - Ve^{i\theta n_0}\psi_1(n_0)\big],$$

и для $n \geqslant n_0$, $n > 0$

$$\psi_1(n) = a_+(\theta,\omega)e^{i\theta n}, \qquad \text{где}$$
$$a_+(\theta,\omega) = 1 - \frac{1}{2i\sin\theta}\big[-\omega^2\psi_2(1)(1+e^{-i\theta}) + \psi_1(1) + \psi_1(0)e^{-i\theta} - Ve^{-i\theta n_0}\psi_1(n_0)\big].$$

Следует заметить, что

$$a_-(\theta,\omega) = \psi_1(0) - 1, \quad a_+(\theta,\omega) = e^{-i\theta n_0}\psi_1(n_0).$$

Для нахождения функций $\psi_1(0)$, $\psi_1(1)$ и $\psi_1(n_0)$ имеем, вследствие (4), систему

$$\begin{cases} p\psi_1(0) + h\psi_1(1) + s\psi_1(n_0) = e^{i\theta n_0}, \\ c\psi_1(0) + d\psi_1(1) + f\psi_1(n_0) = 1, \\ d\psi_1(0) + c\psi_1(1) + b\psi_1(n_0) = e^{i\theta}. \end{cases}$$

Здесь

$$p = \Big(\frac{\omega^2}{2\cos\theta}(1+e^{-i\theta}) - e^{-i\theta}\Big)\frac{e^{i\theta n_0}}{2i\sin\theta}, \quad h = \Big(\frac{\omega^2}{2\cos\theta}(1+e^{-i\theta}) - 1\Big)\frac{e^{i\theta n_0}}{2i\sin\theta},$$
$$c = 1 + \frac{1}{2i\sin\theta}\Big(\frac{\omega^2}{2\cos\theta}(1+e^{i\theta}) - e^{i\theta}\Big), \quad d = \frac{1}{2i\sin\theta}\Big(\frac{\omega^2}{2\cos\theta}(1+e^{i\theta}) - 1\Big),$$
$$s = 1 + \frac{V}{2i\sin\theta}, \quad f = \frac{Ve^{i\theta n_0}}{2i\sin\theta}, \quad b = \frac{Ve^{i\theta(n_0-1)}}{2i\sin\theta}.$$

Записав решение полученной системы с помощью формул Крамера, после преобразований получаем требуемые формулы для коэффициентов отражения и прохождения $a_-(\theta,\omega)$, $a_+(\theta,\omega)$. □

Замечание 1. Имеют место соотношения

$$\lim_{\omega\to 0} P_+(\theta,\omega) = 0, \quad \lim_{\omega\to\infty} P_+(\theta,\omega) = 0, \quad \lim_{V\to\infty} P_+(\theta,\omega) = 0, \quad \lim_{\omega\to\infty,\, V\to\infty} P_+(\theta,\omega) = 0.$$

В следующей теореме для волны, налетающей слева, найдено условие полного прохождения частицы.

Теорема 3. *Пусть* $V = \frac{1-\omega^2}{\omega^2}2\cos\frac{\pi\nu}{n_0}$, $\nu \in \mathbb{N}$. *Тогда справедливо равенство* $P_+(\theta,\omega) = 1$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Знаменатель в выражении для $a_+(\omega,\theta)$ пропорционален выражению

$$\omega^2 V + 2(\omega^2 - 1)\cos\theta + 2i\omega^2\sin\theta \neq 0,$$

далее утверждение теоремы следует из леммы 2. □

Для волны, налетающей справа (то есть знак минус в показателе экспоненты уравнения Липпмана–Швингера (4)), справедлива следующая

Лемма 2. *Имеют место формулы*

$$a_-(\theta,\omega) = \frac{(\cos\theta e^{-i\theta} - \omega^2)(2i\sin\theta + Ve^{-2i\theta n_0}) - Ve^{-i\theta}\cos\theta(1-\omega^2)}{Ve^{2i\theta n_0}e^{-i\theta}\cos\theta(1-\omega^2) + (2i\sin\theta + V)(\omega^2 - \cos\theta e^{-i\theta})},$$
$$a_+(\theta,\omega) = -\frac{2\omega^2\sin^2\theta}{Ve^{2i\theta n_0}e^{-i\theta}\cos\theta(1-\omega^2) + (2i\sin\theta + V)(\omega^2 - \cos\theta e^{-i\theta})}.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о аналогично доказательству леммы 1.

Замечание 2. Отметим разницу со случаем волны, налетающей слева (см. лемма 1). В отличие от коэффициентов, полученных при решении задачи рассеяния для одномерного дискретного оператора Шредингера с «локальным» потенциалом, в рассматриваемом случае коэффициенты прохождения и отражения различны при изменении направления движения волны.

Замечание 3. Имеют место соотношения

$$\lim_{\omega\to 0} P_+(\theta,\omega) = 0, \quad \lim_{V\to\infty} P_+(\theta,\omega) = 0.$$

В следующей теореме для волны, налетающей справа, найдены условия почти полного отражения частицы.

Теорема 4. *Пусть* $\theta = \frac{\pi\nu}{n_0}$, $\nu \in \mathbb{N}$. *Тогда справедливо равенство*

$$\lim_{\omega\to\infty} P_+(\theta,\omega) = 1. \tag{5}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Утверждение теоремы следует из леммы 2. □

Замечание 4. Равенство (5) в силу условия теоремы означает явление конструктивной интерференции (см. [11]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Orellana P.A., Domingulz-Adame F., Gomes I., Ladron de Guevara M.L. Transport through a quantum wire a side quantum-dot array // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 67. 085321 (5 p).
2. Gores J., Goldhaber-Gordon D., Heemeyer S., Kastner M.A. Fano resonances in electronic transport through a single-electron transistor // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. № 3. P. 2188–2195.
3. Fuhrer A., Brusheim P., Ihn T., Sigrist M., Ensslin K., Wegscheider W., Bichler M. Fano effect in a quantum-ring-quantum-dot system with tunable coupling // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73. 205326 (9 p).
4. Chakrabarti A. Fano resonance in discrete lattice models: Controlling lineshapes with impurities // Phys. Letters A. 2007. Vol. 336. Issues 4-5. P. 507–512.
5. Рид М. Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 1. Функциональный анализ. М.: Мир, 1977. 357 с.
6. Baranova L.Y., Chuburin Y.P. Quasi-levels of the two-particle discrete Schrödinger operator with a perturbed periodic potential // J. Phys. A.: Math. Theor. 2008. Vol. 41. № 435205 (11 p).
7. Тинюкова Т.С., Чубурин Ю.П. Квазиуровни дискретного оператора Шредингера с убывающим потенциалом на графе // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2009. Вып. 3. С. 104–113.
8. Баранова Л.Е., Чубурин Ю.П. Квазиуровни двухчастичного дискретного оператора Шредингера с малым потенциалом // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2008. № 1. С. 35–46.
9. Чубурин Ю.П. Об одном дискретном операторе Шредингера на графе // Теоретическая и математическая физика. 2010. Т. 165. № 1. С. 119–133.
10. Тинюкова Т.С. Уравнение Липпмана–Швингера для квантовых проволок // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2011. Вып. 1. С. 99–104.
11. Захарьев Б.Н. Новая азбука квантовой механики. Ижевск: Изд-во УдГУ, 1997. 160 с.

Поступила в редакцию 10.12.2012

Морозова Людмила Евгеньевна, к. ф.-м. н., доцент, Ижевский государственный технический университет имени М.Т. Калашникова, 426069, Россия, г. Ижевск, ул. Студенческая, 7.
E-mail: luvial@mail.ru

L. E. Morozova

The scattering problem for a discrete Schrödinger operator with the "resonant" potential on the graph

Keywords: discrete Schrödinger operator, spectrum, the Lippmann–Schwinger scattering problem, quantum dot.

Mathematical Subject Classifications: 81Q10, 81Q15

We consider a discrete Schrödinger operator on the graph, which is the Hamiltonian in the tight-binding approach of an electron in the system consisting of a quantum wire, and two embedded quantum dots. This operator describes the double-barrier resonant nanostructure, in which one of the barriers is a non-local potential. The essential and absolutely continuous spectra of this operator are described. We study the scattering problem in the stationary approach for two possible directions of particles propagation. The conditions of total reflection and total transmission are found.

REFERENCES

1. Orellana P.A., Domingulz-Adame F., Gomes I., Ladron de Guevara M.L. Transport through a quantum wire a side quantum-dot array, *Phys. Rev. B.*, 2004, vol. 67, 085321 (5 p).

2. Gores J., Goldhaber-Gordon D., Heemeyer S., Kastner M.A. Fano resonances in electronic transport through a single-electron transistor, *Phys. Rev. B.*, 2000, vol. 62, no. 3, pp. 2188–2195.

3. Fuhrer A., Brusheim P., Ihn T., Sigrist M., Ensslin K., Wegscheider W., Bichler M. Fano effect in a quantum-ring-quantum-dot system with tunable coupling, *Phys. Rev. B.*, 2006, vol. 73, 205326 (9 p).

4. Chakrabarti A. Fano resonance in discrete lattice models: Controlling lineshapes with impurities, *Phys. Letters A.*, 2007, vol. 336, issues 4–5, pp. 507–512.

5. Reed M., Simon B. *Metody sovremennoi matematicheskoi fiziki. I. Funktsional'nyi analiz* (Methods of Mathematical Physics. I. Functional analysis), Moscow: Mir, 1977, 357 p.

6. Baranova L.Y., Chuburin Y.P. Quasi-levels of the two-particle discrete Schrödinger operator with a perturbed periodic potential, *J. Phys. A.: Math. Theor.* 2008, vol. 41, no. 435205 (11 p).

7. Tinyukova T.S., Chuburin Y.P. Quasi-levels of the discrete Schrödinger equation with a decreasing potential on a graph, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2009, no. 3, pp. 104–113.

8. Baranova L.E., Chuburin Yu.P. On quasi-levels of the discrete two-particle Schrödinger operator with a decreasing small potential, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2008, no. 1, pp. 35–46.

9. Chuburin Yu.P. A discrete Schrödinger operator on a graph, *Theor. Math. Phys.*, 2010, vol. 165, no. 1, pp. 1335–1347.

10. Tinyukova T.S. The Lippmann–Schwinger equation for quantum wires, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2011, no. 1, pp. 99–104.

11. Zakhar'ev B.N. *Novaya azbuka kvantovoi mekhaniki* (A new alphabet of quantum mechanics), Izhevsk: Udmurt State University, 1997, 160 p.

Received 10.12.2012

Morozova Lyudmila Evgen'evna, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Izhevsk State Technical University, ul. Studencheskaya, 1, Izhevsk, 426069, Russia.
E-mail: luvial@mail.ru