УДК 517.958, 530.145.6

© *Т. С. Тинюкова*

О РАССЕЯНИИ И КВАЗИУРОВНЯХ В МОДЕЛИ SSH

Топологический изолятор — особый тип материала, который внутри («в объеме») представляет собой изолятор, а на поверхности проводит электрический ток. Простейшим топологическим изолятором является конечная цепочка атомов в полиацетилене. Тематика топологических изоляторов в рамках физики твердого тела очень актуальна в последнее время. Большой интерес в физической литературе к топологическим изоляторам (а также похожим на них в смысле топологии сверхпроводящим системам) в значительной степени вызван наличием связи, «соответствием» между «объемом» и «границей». В данной статье рассматривается дискретная модель SSH (Su–Schrieffer–Heeger) для полиацетилена, описывающая электрон в одномерной цепочке атомов с двумя чередующимися амплитудами перехода на соседний атом. Найдены резольвента и спектр рассматриваемого оператора. Исследованы квазиуровни (собственные значения и резонансы) в случае малого потенциала. Кроме того, найдено решение уравнения Липпмана–Швингера и получены асимптотические формулы для вероятностей прохождения и отражения в случае малого возмущения.

Ключевые слова: резольвента, спектр, собственное значение, резонанс, уравнение Липпмана–Швингера, вероятность прохождения.

DOI: 10.20537/vm170209

Введение

В последнее десятилетие в физической литературе активно изучаются топологические изоляторы (см. [1–5]). Топологический изолятор (ТИ) — особый тип материала, который внутри («в объеме») представляет собой изолятор, а на поверхности проводит электрический ток. ТИ обладают интересными физическими свойствами и могут найти применение в разнообразных устройствах микроэлектроники. Эта тематика интересна не только с физической, но и с математической точки зрения, однако недостаточно изучена математиками.

Простейшим ТИ является конечная цепочка атомов в полиацетилене. Одномерная модель SSH (Su–Schrieffer–Heeger) для полиацетилена была рассмотрена в [3] и описывает электрон в конечной цепочке с двумя чередующимися амплитудами перехода на соседний атом. Рассматриваемая цепочка состоит из N ячеек, а каждая ячейка, в свою очередь, из двух узлов, которые принадлежат разным подрешеткам. В данном одномерном случае роль «объема» играет цепочка без двух граничных атомов, а аналогом поверхности является граница цепочки, т. е. эти два атома. Большой интерес в физической литературе к ТИ (а также похожим на них в смысле топологии сверхпроводящим системам) в большой степени вызван наличием связи, «соответствием» между «объемом» и «границей». Это означает следующее. В «объеме», который моделируется бесконечным кристаллом (в данном случае — бесконечной цепочкой), ТИ наделяются тривиальной или нетривиальной топологией в зависимости от параметров модели (в рассматриваемом случае граница между такими фазами описывается равенством $u = v$, см. [3]). При этом ненулевое число Черна (в одномерном случае — «winding number», т. е. степень некоторого отображения) ТИ связано с наличием «граничных состояний», т. е. собственных значений (во многих случаях — с наличием нулевого собственного значения), волновые функции которых локализованы вблизи границы в конечном кристалле (или цепочке).

В данной статье рассматривается дискретная модель SSH в случае бесконечной (в отличие от [3]) одномерной цепочки атомов. В статье топологические вопросы непосредственно не рассматриваются, однако проведенное в ней исследование собственных значений и резонансов, как и существенно связанной с ними вероятности прохождения, может уточнить соответствие «объем–граница» для модели SSH (роль границы в статье играет потенциальный барьер).

Рассмотрим гамильтониан H_0, действующий в пространстве $l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$:

$$H_0 \begin{pmatrix} \psi_1(n) \\ \psi_2(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w\psi_2(n-1) + v\psi_2(n) \\ v\psi_1(n) + w\psi_1(n+1) \end{pmatrix}.$$

Значения v и w означают амплитуды перехода электрона на соседний атом. Считаем, что $v > w > 0$. Оператор H_0 имеет физический смысл оператора кинетической энергии электрона, описываемого функцией $\psi(n) = \begin{pmatrix} \psi_1(n) \\ \psi_2(n) \end{pmatrix} \in l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$.

§ 1. Спектр и резольвента

Теорема 1. *Резольвента $R_0(\lambda) = (H_0 - \lambda)^{-1}$ оператора H_0 действует следующим образом:*

$$(R_0(\lambda)\varphi)_1(n) = \frac{1}{2wvi\sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \big(\lambda\varphi_1(n') + v\varphi_2(n')\big)\, e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi\sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \varphi_2(n') e^{ik|n-1-n'|},$$

$$(R_0(\lambda)\varphi)_2(n) = \frac{1}{2wvi\sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \big(\lambda\varphi_2(n') + v\varphi_1(n')\big)\, e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi\sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \varphi_1(n') e^{ik|n+1-n'|},$$

где

$$2\cos k = \frac{\lambda^2 - v^2 - w^2}{wv}, \quad \sin k = -\sqrt{1 - \cos^2 k} < 0. \tag{1}$$

Доказательство. Уравнение $(H_0 - \lambda)\psi = \varphi$ относительно ψ для нахождения резольвенты $R_0(\lambda)$ запишем в виде

$$\begin{aligned} w\psi_2(n-1) + v\psi_2(n) - \lambda\psi_1(n) &= \varphi_1(n), \\ v\psi_1(n) + w\psi_1(n+1) - \lambda\psi_2(n) &= \varphi_2(n). \end{aligned} \tag{2}$$

После преобразования Фурье $F\colon l^2(\mathbb{Z}) \to L^2(-\pi, \pi)$, действующего следующим образом:

$$F\psi(n) = \widehat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-ipn} \psi(n),$$

(2) примет вид

$$\begin{pmatrix} -\lambda & we^{-ip} + v \\ we^{ip} + v & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\psi}_1 \\ \widehat{\psi}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\varphi}_1 \\ \widehat{\varphi}_2 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Выпишем определитель системы (3):

$$\Delta = \lambda^2 - (w^2 + v^2 + vwe^{ip} + vwe^{-ip}) = \lambda^2 - (w^2 + v^2 + 2vw\cos p).$$

Находим (с помощью формул Крамера)

$$\widehat{\psi}_1 = \frac{\lambda\widehat{\varphi}_1 + (we^{-ip} + v)\widehat{\varphi}_2}{wv(2\cos p - \zeta)}, \quad \widehat{\psi}_2 = \frac{\lambda\widehat{\varphi}_2 + (we^{ip} + v)\widehat{\varphi}_1}{wv(2\cos p - \zeta)},$$

где

$$\zeta = \frac{\lambda^2 - v^2 - w^2}{wv}.$$

Справедливо равенство (см. [6])

$$\psi(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{inp} \widehat{\psi}(p) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{inp}\widehat{\varphi}(p)}{2\cos p - \zeta} dp = \frac{1}{2i\sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{ik|n-n'|} \varphi(n'), \tag{4}$$

МАТЕМАТИКА 2017. Т. 27. Вып. 2

где $\zeta = 2\cos k$, $\sin k = -\sqrt{1-\cos^2 k} < 0$.
С помощью (4) найдем резольвенту в координатном представлении

$$\psi_1(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\left(\lambda\widehat{\varphi}_1 + (we^{-ip}+v)\widehat{\varphi}_2\right) e^{inp}}{wv(2\cos p - \zeta)}\, dp =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{inp}\left(\lambda\widehat{\varphi}_1 + v\widehat{\varphi}_2\right)}{wv(2\cos p - \zeta)}\, dp + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{ip(n-1)}\widehat{\varphi}_2}{v(2\cos p - \zeta)}\, dp =$$
$$= \frac{1}{2wvi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \left(\lambda\varphi_1(n') + v\varphi_2(n')\right) e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \varphi_2(n') e^{ik|n-1-n'|},$$
$$\psi_2(n) = \frac{1}{2wvi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \left(\lambda\varphi_2(n') + v\varphi_1(n')\right) e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \varphi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}.$$

□

Замечание 1. Из (3) очевидно, что H_0 — самосопряженный оператор и спектр H_0 вещественный. Резольвента $R_0(\lambda)$ не существует, если $\Delta = 0$, т. е. если $\lambda = \pm\sqrt{w^2+v^2+2vw\cos k}$. Отсюда следует, что спектр H_0 состоит из двух промежутков:

$$\sigma(H_0) = [-v-w, w-v] \cup [v-w, v+w].$$

§ 2. Квазиуровни

Рассмотрим оператор с экспоненциально убывающим потенциалом $H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon V$, где $V = \begin{pmatrix} V_1 g(n) & 0 \\ 0 & V_2 g(n) \end{pmatrix}$, $|g(n)| \leqslant Ce^{-\alpha|n|}$, V_1, $V_2 \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$, $\alpha > 0$. Операторы H_ε и V имеют физический смысл соответственно операторов полной и потенциальной энергии электрона.

Уравнение на собственные значения $(H_0+\varepsilon V)\psi = \lambda\psi$ или $\psi = -\varepsilon R_0(\lambda)V\psi$, где $\lambda \notin \sigma(H_0)$, оператора H_ε перепишем с учетом вида резольвенты оператора H_0 (см. теорему 1):

$$\begin{aligned} \psi_1(n) = &-\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \left(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\right) g(n') e^{ik|n-n'|} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} V_2 g(n')\psi_2(n') e^{ik|n-1-n'|}, \\ \psi_2(n) = &-\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \left(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\right) g(n') e^{ik|n-n'|} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} V_1 g(n')\psi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}. \end{aligned} \tag{5}$$

Обозначим $\varphi_i(n) = \sqrt{|g(n)|}\psi_i(n)$, $i = 1, 2$. Тогда

$$\begin{aligned} \varphi_1(n) = &-\frac{\varepsilon\sqrt{|g(n)|}}{2wvi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \sqrt{g(n')} \left(\lambda V_1\varphi_1(n') + vV_2\varphi_2(n')\right) e^{ik|n-n'|} - \\ &- \frac{\varepsilon\sqrt{|g(n)|}}{2vi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \sqrt{g(n')} V_2\varphi_2(n') e^{ik|n-1-n'|}, \\ \varphi_2(n) = &-\frac{\varepsilon\sqrt{|g(n)|}}{2wvi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \sqrt{g(n')} \left(\lambda V_2\varphi_2(n') + vV_1\varphi_1(n')\right) e^{ik|n-n'|} - \\ &- \frac{\varepsilon\sqrt{|g(n)|}}{2vi\sin k} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \sqrt{g(n')} V_1\varphi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}. \end{aligned} \tag{6}$$

Определение 1. Значение λ назовем *резонансом* оператора H_ε, если решению $\varphi \in l^2(\mathbb{Z})\times l^2(\mathbb{Z})$ уравнения (6) соответствует решение (5) $\psi \notin l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$.

Определение 2. *Квазиуровнем* оператора будем называть резонанс или собственное значение.

Перепишем (6) в виде

$$\varphi_1(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\sqrt{g(n')}\left(\pm V_1\varphi_1(n') + V_2\varphi_2(n')\right) + \varepsilon(K_{11}(k)\varphi_1 + K_{12}(k)\varphi_2)(n),$$

$$\varphi_2(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\sqrt{g(n')}\left(\pm V_2\varphi_2(n') + V_1\varphi_1(n')\right) + \varepsilon(K_{21}(k)\varphi_1 + K_{22}(k)\varphi_2)(n),$$

где K_{sl}, $s,l=1,2$, аналитически зависят от k, знак «$\pm$» соответствует знаку переменной λ. Экспоненциальное убывание $\sqrt{|g(n)|}$ определяет принадлежность функций $\varphi_i(n)$, $i=1,2$ пространству $l^2(\mathbb{Z})$.

Положим $K = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22}\end{pmatrix}$, $\xi = \begin{pmatrix}\xi_1 \\ \xi_2\end{pmatrix}$, $\xi = (1-\varepsilon K)(\varphi_1,\varphi_2)$. Тогда

$$\xi_1(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik}\left(\pm V_1\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\xi)_1,\sqrt{g}\right) + V_2\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\xi)_2,\sqrt{g}\right)\right),$$

$$\xi_2(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik}\left(V_1\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\xi)_1,\sqrt{g}\right) \pm V_2\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\xi)_2,\sqrt{g}\right)\right) \tag{7}$$

и

$$\xi_1(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik}C_1(k), \quad \xi_2(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik}C_2(k). \tag{8}$$

Подставим (8) в (7), получим числовую (при фиксированном k) систему

$$C_1(k) = -\frac{\varepsilon(v+w)}{2wvik}\left(\pm V_1\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\sqrt{|g|})_1,\sqrt{g}\right)C_1(k) + V_2\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\sqrt{|g|})_2,\sqrt{g}\right)C_2(k)\right),$$

$$C_2(k) = -\frac{\varepsilon(v+w)}{2wvik}\left(V_1\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\sqrt{|g|})_1,\sqrt{g}\right)C_1(k) \pm V_2\left(((1-\varepsilon K)^{-1}\sqrt{|g|})_2,\sqrt{g}\right)C_2(k)\right).$$

Существование решения получившейся системы эквивалентно равенству

$$\begin{vmatrix} 2wvik \pm \varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(v+w)V_1 & \varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(v+w)V_2 \\ \varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(v+w)V_1 & 2vwik \pm \varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(v+w)V_2 \end{vmatrix} = 0, \tag{9}$$

где $\overline{g} = \sum\limits_{n\in\mathbb{Z}} g(n)$ и функция $\alpha(k,\varepsilon)$ ограничена равномерно по k из окрестности нуля, т. е.

$$|\alpha(k,\varepsilon)| < C\varepsilon.$$

Перепишем (9) в виде

$$(2vwik \pm \varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(v+w)V_1)\times$$
$$\times(2vwik \pm \varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(v+w)V_2) = V_1V_2\left(\varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(v+w)\right)^2,$$

$$2vwik \pm (v+w)\varepsilon(\overline{g}+\alpha(k,\varepsilon))(V_1+V_2) = 0.$$

Согласно теореме Руше, уравнение (9) для всех достаточно малых ε имеет единственное решение k, для которого, очевидно, справедливо равенство

$$k = \mp\frac{(v+w)\overline{g}}{2wvi}(V_1+V_2)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \tag{10}$$

В силу (1) и (10) в окрестности нуля справедливо следующее представление:

$$\lambda = \lambda(k) = \lambda(0) + \lambda'(0)k + \frac{\lambda''(0)}{2}k^2 + O(\varepsilon^3) = \pm(v+w) \pm \frac{v+w}{8wv}(V_1+V_2)^2\overline{g}^2\varepsilon^2 + O(\varepsilon^3).$$

Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 2. *В некоторой окрестности точки $\lambda = v + w$ ($\lambda = -(v + w)$) для достаточно малых $\varepsilon > 0$ существует единственное собственное значение λ_+ (единственный резонанс λ_-) оператора H_ε, аналитически зависящее от ε, для которого справедлива формула*

$$\lambda_\pm = \pm(v + w) \pm \frac{v + w}{8wv}(V_1 + V_2)^2 \overline{g}^2 \varepsilon^2 + O(\varepsilon^3).$$

§ 3. Уравнение Липпмана–Швингера

Найдем решение ψ_0 уравнения $H_0\psi_0 = \lambda\psi_0$, отвечающее рассеивающему состоянию. Ищем ψ_0 в виде

$$\psi_0(n) = \begin{pmatrix} Ae^{ikn} \\ Be^{ikn} \end{pmatrix}, \quad A, B = \text{const}.$$

Подставляя ψ_0, имеем

$$\begin{cases} cwBe^{-ik} + vB - \lambda A = 0, \\ vA + wAe^{ik} - \lambda B = 0, \end{cases}$$

или

$$\begin{pmatrix} -\lambda & we^{-ik} + v \\ we^{ik} + v & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

Полученная система имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю, т. е. $\lambda = \pm\sqrt{w^2 + v^2 + 2vw\cos k}$ и $B = \dfrac{\lambda}{we^{-ik} + v}A$. Следовательно,

$$\psi_0(n) = \begin{pmatrix} Ae^{ikn} \\ \dfrac{\lambda A}{we^{-ik} + v}e^{ikn} \end{pmatrix}.$$

Условие нормировки для ψ_0

$$A^2 + \frac{\lambda^2 A^2}{|we^{-ik} + v|^2} = 1$$

выполнено, если $A = \dfrac{\sqrt{2}}{2}$. Итак,

$$\psi_0(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} e^{ikn} \\ \dfrac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik} + v} \end{pmatrix}.$$

Теорема 3. *Предположим, что ε достаточно мало и $k = D\varepsilon$, $D \neq 0$. Тогда существует единственное решение уравнения Липпмана–Швингера для оператора H_ε, имеющее вид*

$$\psi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2} \mp \frac{\sqrt{2}\overline{g}(w + v)(V_1 + V_2)}{4wviD \pm 2\overline{g}(w + v)(V_1 + V_2)} + O(\varepsilon), \quad \psi_2(n) = -\frac{\sqrt{2}\overline{g}(w + v)(V_1 + V_2)}{4wviD \pm 2\overline{g}(w + v)(V_1 + V_2)} + O(\varepsilon),$$

где $\overline{g} = \sum\limits_{n \in \mathbb{Z}} g(n)$, знак «$\pm$» соответствует знаку переменной $\lambda = \pm(w + v)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Уравнение Липпмана–Швингера для оператора H_ε имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_1(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2}e^{ikn} - \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n' \in \mathbb{Z}} \big(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\big)\, g(n')e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_2 g(n')\psi_2(n')e^{ik|n-1-n'|}, \\ \psi_2(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik} + v} - \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n' \in \mathbb{Z}} \big(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\big)\, g(n')e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_1 g(n')\psi_1(n')e^{ik|n+1-n'|}. \end{aligned} \tag{11}$$

Введем обозначение $\varphi_i(n) = \sqrt{|g(n)|}\psi_i(n)$, $i = 1, 2$. В условиях теоремы и в силу (1) (знак «$\pm$» далее соответствует знаку переменной λ) перепишем (11) следующим образом:

$$\varphi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2wviD}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\left(\pm(w+v)V_1\varphi_1(n') + vV_2\varphi_2(n')\right)\sqrt{g(n')} -$$
$$- \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2viD}\sum_{n'\in\mathbb{Z}} V_2\sqrt{g(n')}\varphi_2(n') + \varepsilon(L_{11}(\varepsilon)\varphi_1 + L_{12}(\varepsilon)\varphi_2)(n),$$
$$\varphi_2(n) = \pm\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2wviD}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\left(\pm(w+v)V_2\varphi_2(n') + vV_1\varphi_1(n')\right)\sqrt{g(n')} -$$
$$- \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2viD}\sum_{n'\in\mathbb{Z}} V_1\sqrt{g(n')}\varphi_1(n') + \varepsilon(L_{21}(\varepsilon)\varphi_1 + L_{22}(\varepsilon)\varphi_2)(n),$$

где L_{sk}, $s, k = 1, 2$, аналитически зависят от ε.

Положим $L = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}$, $\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$, $\xi = (1-\varepsilon L)(\varphi_1, \varphi_2)$. Тогда

$$\xi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD}\left(\pm V_1\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\xi)_1, \sqrt{g}\right) + V_2\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\xi)_2, \sqrt{g}\right)\right),$$
$$\xi_2(n) = \pm\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD}\left(V_1\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\xi)_1, \sqrt{g}\right) \pm V_2\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\xi)_2, \sqrt{g}\right)\right), \tag{12}$$

и

$$\xi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD}C_1(\varepsilon),\ \xi_2(n) = \pm\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD}C_2(\varepsilon). \tag{13}$$

Подставим (13) в (12), получим систему

$$C_1(\varepsilon) = \pm V_1\left(\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD}C_1(\varepsilon)\right)\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_1, \sqrt{g}\right) +$$
$$+ V_2\left(\pm\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD}C_2(\varepsilon)\right)\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_2, \sqrt{g}\right),$$
$$C_2(\varepsilon) = V_1\left(\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD}C_1(\varepsilon)\right)\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_1, \sqrt{g}\right) \pm$$
$$\pm V_2\left(\pm\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD}C_2(\varepsilon)\right)\left(((1-\varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_2, \sqrt{g}\right),$$

или

$$\begin{pmatrix} 2wviD \pm (\overline{g}+O(\varepsilon))(v+w)V_1 & (\overline{g}+O(\varepsilon))(v+w)V_2 \\ (\overline{g}+O(\varepsilon))(v+w)V_1 & 2vwiD \pm (\overline{g}+O(\varepsilon))(v+w)V_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} =$$
$$= \frac{\sqrt{2}}{2}(V_1+V_2)(\overline{g}+O(\varepsilon))\begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Система (14) имеет единственное решение:

$$C_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta} + O(\varepsilon), \quad C_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta} + O(\varepsilon),$$

где

$$\Delta_1 = \mp\sqrt{2}wviD\overline{g}(w+v)(V_1+V_2), \quad \Delta_2 = -\sqrt{2}wviD\overline{g}(w+v)(V_1+V_2) = \pm\Delta_1,$$
$$\Delta = -4w^2v^2D^2 \pm 2wviD\overline{g}(w+v)(V_1+V_2).$$

Заметим, что $\Delta \neq 0$, т. к. v и w положительные числа (см. введение), значения V_1, V_2, D, $\overline{g}$ — вещественные, $D \neq 0$, тогда хотя бы действительная часть Δ не равна нулю. $\square$

Заметим, что условие $k = O(\varepsilon)$ означает малость как потенциала, так и скоростей частиц.

§ 4. Рассеяние

В окрестности точки λ_0 из непрерывного спектра оператора H_0 перепишем уравнение Липпмана–Швингера (11) для оператора H_ε в виде

$$\begin{aligned}\psi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}e^{ikn} &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\left(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\right)g(n')e^{ik(n-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'>n}\left(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\right)g(n')\left(e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}\right) - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}V_2 g(n')\psi_2(n')e^{ik(n-1-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'>n-1}V_2 g(n')\psi_2(n')\left(e^{-ik(n-1-n')} - e^{ik(n-1-n')}\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_2(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik}+v} &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\left(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\right)g(n')e^{ik(n-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'>n}\left(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\right)g(n')\left(e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}\right) - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}V_1 g(n')\psi_1(n')e^{ik(n+1-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'>n+1}V_1 g(n')\psi_1(n')\left(e^{-ik(n+1-n')} - e^{ik(n+1-n')}\right),\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}\psi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}e^{ikn} &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\left(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\right)g(n')e^{-ik(n-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'<n}\left(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\right)g(n')\left(e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}\right) - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}V_2 g(n')\psi_2(n')e^{-ik(n-1-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'<n-1}V_2 g(n')\psi_2(n')\left(e^{ik(n-1-n')} - e^{-ik(n-1-n')}\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_2(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik}+v} &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\left(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\right)g(n')e^{-ik(n-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'<n}\left(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\right)g(n')\left(e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}\right) - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}V_1 g(n')\psi_1(n')e^{-ik(n+1-n')} - \\ &- \frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'<n+1}V_1 g(n')\psi_1(n')\left(e^{ik(n+1-n')} - e^{-ik(n+1-n')}\right).\end{aligned}$$

Отсюда

$$\psi_1(n,k) = \frac{\sqrt{2}}{2}e^{ikn} + A_1^{\pm}(k)e^{\pm ikn} + \eta_1^{\pm}(n,k),$$
$$\psi_2(n,k) = \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik}+v} + A_2^{\pm}(k)e^{\pm ikn} + \eta_2^{\pm}(n,k)$$

(знаки «+» и «−» отвечают $n > 0$ и $n \leqslant 0$ соответственно), где

$$A_1^{\pm}(k) = -\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\big(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\big)g(n')e^{\mp ikn'} - \\ -\frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}} V_2 g(n')\psi_2(n')e^{\mp ik(n'+1)},$$

$$A_2^{\pm}(k) = -\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\big(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\big)g(n')e^{\mp ikn'} - \\ -\frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'\in\mathbb{Z}} V_1 g(n')\psi_1(n')e^{\mp ik(n'-1)},$$

$$\eta_1^{+}(n,k) = -\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'>n}\big(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\big)g(n')\left(e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}\right) - \\ -\frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'>n-1} V_2 g(n')\psi_2(n')\left(e^{-ik(n-1-n')} - e^{ik(n-1-n')}\right),$$

$$\eta_1^{-}(n,k) = -\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'<n}\big(\lambda V_1\psi_1(n') + vV_2\psi_2(n')\big)g(n')\left(e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}\right) - \\ -\frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'<n-1} V_2 g(n')\psi_2(n')\left(e^{ik(n-1-n')} - e^{-ik(n-1-n')}\right),$$

$$\eta_2^{+}(n,k) = -\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'>n}\big(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\big)g(n')\left(e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}\right) - \\ -\frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'>n+1} V_1 g(n')\psi_1(n')\left(e^{-ik(n+1-n')} - e^{ik(n+1-n')}\right),$$

$$\eta_2^{-}(n,k) = -\frac{\varepsilon}{2wvi\sin k}\sum_{n'<n}\big(\lambda V_2\psi_2(n') + vV_1\psi_1(n')\big)g(n')\left(e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}\right) - \\ -\frac{\varepsilon}{2vi\sin k}\sum_{n'<n+1} V_1 g(n')\psi_1(n')\left(e^{ik(n+1-n')} - e^{-ik(n+1-n')}\right).$$

Легко видеть, что функция

$$\eta(n,k) = \begin{pmatrix} \eta_1(n,k) \\ \eta_2(n,k) \end{pmatrix},$$

где

$$\eta_1(n,k) = \begin{cases} \eta_1^{+}(n,k), & n > 0, \\ \eta_1^{-}(n,k), & n \leqslant 0, \end{cases} \qquad \eta_2(n,k) = \begin{cases} \eta_2^{+}(n,k), & n > 0, \\ \eta_2^{-}(n,k), & n \leqslant 0, \end{cases}$$

является аналитической $l^2(\mathbb{Z})\times l^2(\mathbb{Z})$-значной функцией в окрестности точки λ_0 (доказательство аналогичного утверждения см. в [7]).

Определим $P_+ = \left|\frac{\sqrt{2}}{2} + A_1^{+}\right|^2 + \left|\frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\lambda}{we^{-ik}+v} + A_2^{+}\right|^2$ — вероятность прохождения, $P_- = \left|A_1^{-}\right|^2 + \left|A_2^{-}\right|^2$ — вероятность отражения.

Теорема 4. *В условиях теоремы 3 справедливы равенства*

$$P_+ = \left|\frac{2wviD}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_1)\overline{g}}\right|^2 + O(\varepsilon), \quad P_- = \left|\frac{(w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}\right|^2 + O(\varepsilon).$$

Доказательство. Используя результаты теоремы 3, имеем

$$A_1^+ = -\frac{\overline{g}}{2wviD}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}+C\right)(\pm V_1(w+v) \pm vV_2) \mp \frac{\overline{g}V_2}{2viD}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}+C\right) + O(\varepsilon) =$$

$$= \mp\frac{(w+v)\overline{g}}{2wviD}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}+C\right)(V_1+V_2) + O(\varepsilon) = \mp\frac{\sqrt{2}}{2}\frac{(w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\overline{g}} + O(\varepsilon),$$

$$A_2^+ = -\frac{\overline{g}}{2wviD}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}+C\right)(V_2(w+v)+vV_1) - \frac{\overline{g}V_1}{2viD}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}+C\right) + O(\varepsilon) =$$

$$= -\frac{w+v}{2wviD}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}+C\right)\overline{g}(V_1+V_2) + O(\varepsilon) = -\frac{\sqrt{2}}{2}\frac{(w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\overline{g}} + O(\varepsilon),$$

где $C = \mp\frac{\sqrt{2}\overline{g}(w+v)(V_1+V_2)}{4wviD \pm 2\overline{g}(w+v)(V_1+V_2)}$. Очевидно, что с точностью до $O(\varepsilon)$ справедливы равенства $A_1^+ = A_1^-$, $A_2^+ = A_2^-$ и

$$P_+ = \left|\frac{\sqrt{2}}{2} \mp \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{(w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}\right|^2 + \left|\pm\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{(w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}\right|^2 =$$

$$= \left|\frac{2wviD}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_1)\overline{g}}\right|^2,$$

$$P_- = \left|\frac{(w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\overline{g}}\right|^2.$$

□

Заметим, что при $V_1 = -V_2$ и $\overline{g} = 0$ отражение отсутствует.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hasan M.Z., Kane C.L. Colloquium: topological insulators // Reviews of Modern Physics. 2010. Vol. 82. Issue 4. P. 3045–3067. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3045
2. Bardarson J.H., Moore J.E. Quantum interference and Aharonov–Bohm oscillations in topological insulators // Rep. Progr. Phys. 2013. Vol. 76. No. 5. 056501. DOI: 10.1088/0034-4885/76/5/056501
3. Asbóth J.K., Oroszlány L., Pályi A. A short course on topological insulators: band-structure topology and edge states in one and two dimensions / Lecture Notes in Physics. 2016. Vol. 919. DOI: 10.1007/978-3-319-25607-8
4. Ruzicka F. Hilbert space inner products for $\mathcal{PT}$-symmetric Su–Schrieffer–Heeger models // International Journal of Theoretical Physics. 2015. Vol. 54. Issue 11. P. 4154–4163. DOI: 10.1007/s10773-015-2531-4
5. Leijnse M., Flensberg K. Introduction to topological superconductivity and Majorana fermions // Semiconductor Science and Technology. 2012. Vol. 27. No. 12. 124003. DOI: 10.1088/0268-1242/27/12/124003
6. Тинюкова Т.С. Двумерный разностный оператор Дирака в полосе // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2015. Т. 25. Вып. 1. С. 93–100. DOI: 10.20537/vm150110
7. Тинюкова Т.С. Рассеяние в случае дискретного оператора Шрёдингера для пересекающихся квантовых проволок // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2012. Вып. 3. С. 74–84. DOI: 10.20537/vm120308

МАТЕМАТИКА 2017. Т. 27. Вып. 2

Поступила в редакцию 01.02.2017

Тинюкова Татьяна Сергеевна, к. ф.-м. н., доцент, кафедра математического анализа, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.
E-mail: ttinyukova@mail.ru

T. S. Tinyukova

Scattering and quasilevels in the SSH model

Citation: *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2017, vol. 27, issue 2, pp. 257–266 (in Russian).

Keywords: resolution, spectrum, eigenvalue, resonance, Lippmann–Schwinger equation, probability of reflection.

MSC2010: 81Q10, 81Q15

DOI: 10.20537/vm170209

Topological insulator is a special type of material that represents an insulator in the interior ("in bulk") and conducts electricity on the surface. The simplest topological insulator is a finite chain of atoms in polyacetylene. In the last decade topological insulators are actively studied in the physics literature. A great interest to topological insulators (and also to topologically similar superconducting systems) is due to the presence of a link between "volume" and "boundary". In this article, we have studied the discrete model SSH (Su–Schrieffer–Heeger) for polyacetylene. This model describes an electron in a one-dimensional chain of atoms with two alternating amplitudes of the transition to a neighboring atom. We have found the spectrum and resolution of this operator. The quasilevels (eigenvalues and resonances) in the case of a small potential have been investigated. In addition, we obtained a solution of the Lippmann–Schwinger equation and asymptotic formulas for the probability of transmission and reflection in case of small perturbation.

REFERENCES

1. Hasan M.Z., Kane C.L. Colloquium: topological insulators, *Reviews of Modern Physics*, 2010, vol. 82, issue 4, pp. 3045–3067. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3045
2. Bardarson J.H., Moore J.E. Quantum interference and Aharonov–Bohm oscillations in topological insulators, *Rep. Progr. Phys.*, 2013, vol. 76, no. 5, 056501. DOI: 10.1088/0034-4885/76/5/056501
3. Asbóth J.K., Oroszlány L., Pályi A. *A short course on topological insulators: band-structure topology and edge states in one and two dimensions*, Lecture Notes in Physics, 2016, vol. 919. DOI: 10.1007/978-3-319-25607-8
4. Ruzicka F. Hilbert space inner products for $\mathcal{PT}$-symmetric Su–Schrieffer–Heeger models, *International Journal of Theoretical Physics*, 2015, vol. 54, issue 11, pp. 4154–4163. DOI: 10.1007/s10773-015-2531-4
5. Leijnse M., Flensberg K. Introduction to topological superconductivity and Majorana fermions, *Semiconductor Science and Technology*, 2012, vol. 27, no. 12, 124003. DOI: 10.1088/0268-1242/27/12/124003
6. Tinyukova T.S. Two-dimensional difference Dirac operator in the strip, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2015, vol. 25, issue 1, pp. 93–100 (in Russian). DOI: 10.20537/vm150110
7. Tinyukova T.S. Scattering in the case of the discrete Schrödinger operator for intersected quantum wires, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2012, issue 3, pp. 74–84 (in Russian). DOI: 10.20537/vm120308

Received 01.02.2017

Tinyukova Tat'yana Sergeevna, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Department of Mathematical Analysis, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia.
E-mail: ttinyukova@mail.ru