Задача рассеяния в квантовом волноводе в приближении сильной связи

И. А. Адо

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
E-mail: ado@matematika.phys.msu.ru

Статья поступила 14.04.2010, подписана в печать 29.04.2010

В приближении сильной связи рассмотрена задача рассеяния в квантовом волноводе. Установлено соотношение между стационарным и нестационарным определениями матрицы рассеяния.

Ключевые слова: матрица рассеяния, квантовый волновод, модель сильной связи.
УДК: 51-73. PACS: 03.65.Nk, 73.21.Hb, 73.23.Ad.

Введение

Модель сильной связи является широко распространенной в численных экспериментах в физике твердого тела [1, 2]. В частности, изучение разностной аппроксимации уравнения Шрёдингера приводит к модели сильной связи [3]. Задача рассеяния для модели сильной связи возникает при расчете коэффициентов переноса в приближении теории линейного отклика. Согласно теории Ландауэра–Бутикера, проводимость выражается через коэффициенты прохождения в матрице рассеяния, понимаемой как матрица, составленная из коэффициентов прохождения и отражения [4, 5]. В абстрактной теории рассеяния матрица рассеяния понимается как матрица оператора рассеяния в спектральном представлении невозмущенного оператора эволюции. Часто эти два подхода называют соответственно стационарным и нестационарным. Возникает проблема согласования двух упомянутых определений матрицы рассеяния, решение которой позволит применять мощные методы современной теории рассеяния для расчета коэффициентов переноса.

В монографии [6] можно найти решение этой задачи для случая, когда невозмущенный оператор эволюции является дифференциальным оператором с постоянными коэффициентами. Для одномерного квантового волновода в приближении сильной связи подобное согласование выполнено в [7]. Развивая идеи работы [7], установим соотношение между двумя определениями матрицы рассеяния в квантовом волноводе с сечением произвольной размерности в приближении сильной связи. Ограничимся тем случаем, когда возмущенный гамильтониан действует в том же пространстве, что и невозмущенный. Имея ввиду специфику модели сильной связи, также будем считать, что возмущение конечномерно. Тем не менее обобщение результатов на случай, например, быстроубывающих возмущений не представляет труда.

В теории, использующей дифференциальные операторы, пространством состояний в волноводе является пространство функций непрерывного аргумента, заданных в цилиндрической области, бесконечной вдоль направляющих, поперечное сечение которой есть некоторое ограниченное подмножество $\mathbb{R}^d$. В нашем случае мы заменим цилиндрическую область ее дискретным аналогом — решеткой, бесконечной вдоль положительного и отрицательного направлений выбранной координатной оси. Что касается множества в сечении, нам важно лишь, что оно является ограниченным и, следовательно, конечным. Благодаря этому невозмущенный оператор эволюции в сечении оказывается конечномерным.

В разделе 1 определяются используемые в работе пространства и операторы. Основное пространство задается как тензорное произведение конечномерного сечения на $l^2_{\mathbb{Z}}$. Соответственно невозмущенный гамильтониан является суммой конечномерного самосопряженного оператора, действующего в сечениях, и разностной аппроксимации оператора Лапласа, действующей вдоль направляющих. Последняя часто используется в физике твердого тела. Явный вид граничных условий, а также пространства и оператора в сечении не конкретизируются, что обеспечивает несколько большую общность результатов. Раздел 2 посвящен получению спектрального представления невозмущенного гамильтониана. В разделе 3 естественным образом вводится понятие о коэффициентах прохождения и отражения и в рамках традиционного подхода решается задача рассеяния. В разделе 4 мы находим матрицу рассеяния в соответствии с абстрактной теорией и показываем, что она состоит из коэффициентов прохождения и отражения. Результат работы сформулирован в теореме 2.

1. Пространства и операторы

Множество целых чисел от единицы до n $(n>1)$ обозначим $\mathbb{S}_n$. Нам понадобятся следующие пространства:

$$l(\mathbb{S}_n)=\{f:\mathbb{S}_n\mapsto\mathbb{C}\},$$
$$l(\mathbb{Z})=\{f:\mathbb{Z}\mapsto\mathbb{C}\},$$
$$l^2(\mathbb{Z})=\Big\{f:\mathbb{Z}\mapsto\mathbb{C}\;\Big|\;\sum_{j\in\mathbb{Z}}|f(j)|^2<\infty\Big\},$$
$$l^2_a(\mathbb{Z})=\Big\{f:\mathbb{Z}\mapsto\mathbb{C}\;\Big|\;\sum_{j\in\mathbb{Z}}|f(j)|^2e^{-a|j|}<\infty\Big\}.$$

Здесь $a\in\mathbb{R}$.

Фазовое пространство системы определим так: $H=l(\mathbb{S}_n)\otimes l^2(\mathbb{Z})$. Скалярное произведение в пространстве H задается билинейной формой

$$\langle f,g\rangle_H=\sum_{l\in\mathbb{S}_n,\ j\in\mathbb{Z}}\overline{f(l,j)}\,g(l,j).$$

Нам также понадобится обычно используемое оснащение пространства H: гильбертовы пространства $H_a = l(\mathbb{S}_n)\otimes l_a^2(\mathbb{Z})$ и $H_{-a} = l(\mathbb{S}_n)\otimes l_{-a}^2(\mathbb{Z})$. Будем считать, что форма $\langle\ ,\ \rangle_H$ расширена до двойственности между H_a и H_{-a}.

Определение. $A\colon l(\mathbb{S}_n)\mapsto l(\mathbb{S}_n)$ — линейный самосопряженный оператор.

Определение. Оператор $\Delta_{\mathbb{Z}}\colon l(\mathbb{Z})\mapsto l(\mathbb{Z})$ действует по правилу

$$(\Delta_{\mathbb{Z}}f)(j) = -f(j+1) + 2f(j) - f(j-1).$$

Определение. Оператор $L_0\colon l(\mathbb{S}_n)\otimes l(\mathbb{Z})\mapsto l(\mathbb{S}_n)\otimes l(\mathbb{Z})$ действует по правилу

$$L_0 f = (A\otimes I)f + (I\otimes\Delta_{\mathbb{Z}})f.$$

Оператор возмущения $V\colon l(\mathbb{S}_n)\otimes l(\mathbb{Z})\mapsto l(\mathbb{S}_n)\otimes l(\mathbb{Z})$ определяется своими матричными элементами:

$$(Vf)(l,j) = \sum_{\substack{p\in\mathbb{S}_n\\ m\in\mathbb{Z}}} V(l,j,p,m)f(p,m).$$

Ограничения введенных операторов на подпространства будем обозначать теми же символами, что и сами операторы.

Лемма 1. *Если выполнено*
1) $V(l,j,p,m) = \overline{V(p,m,l,j)}$,
2) $\exists N\in\mathbb{N}$: $(|j|\geqslant N \vee |m|\geqslant N)\Rightarrow (V(l,j,p,m)=0)$,
то V — самосопряженный оператор в H и при $a>0$ является компактным при действии из H_a в H_{-a}.

Доказательство. Второе условие означает, что V — конечномерный оператор. Отсюда вытекает заявленная компактность. Самосопряженность же следует из первого условия. □

Положим $L = L_0 + V$. Будем исследовать оператор рассеяния для пары операторов L, L_0 в пространстве H.

2. Спектральный анализ

2.1. Оператор A (в пространстве $l(\mathbb{S}_n)$)

Как известно, самосопряженный конечномерный оператор A с учетом кратности имеет ровно n собственных значений. Обозначим их ν_q $(1\leqslant q\leqslant n)$ и будем считать, что все они различны. Соответствующие ортонормированные собственные функции обозначим $\psi_q(l)$:

$$A\psi_q(l) = \nu_q\psi_q(l), \quad \langle\psi_q,\psi_r\rangle_{l(\mathbb{S}_n)} = \delta_{qr}.$$

Ортопроекторы на собственные подпространства оператора A имеют вид

$$P_q f(l) = \sum_{p\in\mathbb{S}_n}\left[\psi_q(l)\psi_q(p)f(p)\right]. \tag{1}$$

Если же у оператора A есть кратные собственные значения, то необходимо выделить какую-нибудь ортнонормированную систему его собственных функций $\{\psi_q\}$. Тогда все дальнейшие рассуждения и результаты останутся в силе и в этом случае, лишь только индексом q будут нумероваться не различные собственные значения, а различные собственные функции.

2.2. Оператор $\Delta_{\mathbb{Z}}$ (в пространстве $l^2(\mathbb{Z})$)

В работе [8] исследованы спектральные свойства оператора $\Delta_{\mathbb{Z}}$, приведем здесь соответствующие результаты. Обозначим

$$k(z) = \arccos(1 - z/2), \quad \operatorname{Im} k(z) > 0.$$

Спектр $\sigma(\Delta_{\mathbb{Z}})$ оператора $\Delta_{\mathbb{Z}}$ абсолютно непрерывен и представляет собой отрезок $[0,4]$. Резольвента дается формулой

$$R_{\lambda+i\varepsilon}(\Delta_{\mathbb{Z}})f(j) = \sum_{m\in\mathbb{Z}}\left[\frac{e^{ik(\lambda+i\varepsilon)|m-j|}}{2i\sin k(\lambda+i\varepsilon)}f(m)\right]$$

при $\varepsilon>0$. Для финитных f при $\lambda\notin\{0,4\}$ существуют предельные значения

$$R_{\lambda+i0}(\Delta_{\mathbb{Z}})f(j) = \sum_{m\in\mathbb{Z}}\left[\frac{e^{ik(\lambda)|m-j|}}{2i\sin k(\lambda)}f(m)\right]. \tag{2}$$

2.3. Оператор L_0 (в пространстве H)

Учитывая перестановочность операторов $(A\otimes I)$ и $(I\otimes\Delta_{\mathbb{Z}})$, можно получить равенство

$$R_\lambda(L_0) = \sum_{1\leqslant q\leqslant n} R_{\lambda-\nu_q}(\Delta_{\mathbb{Z}})P_q \tag{3}$$

в предположении, что правая часть (3) существует. Отсюда вытекает, что спектр $\sigma(L_0)$ оператора L_0 есть отрезок $[\nu_1, \nu_n{+}4]$ и что он абсолютно непрерывен.

Как указано в пункте 2.2, если $\lambda\notin\{\nu_q,\nu_q{+}4\}$, где $1\leqslant q\leqslant n$, то для всюду плотного в H множества финитных функций существуют пределы $R_{\lambda+i0}(L_0)f(l,j)$, и при этом

$$R_{\lambda+i0}(L_0)f(l,j) = \sum_{1\leqslant q\leqslant n} R_{\lambda-\nu_q+i0}(\Delta_{\mathbb{Z}})P_q f(l,j).$$

Воспользовавшись (1), (2), равенством $R_{\lambda-i0}(\Delta_{\mathbb{Z}}) = R^*_{\lambda+i0}(\Delta_{\mathbb{Z}})$, а также формулой Стоуна

$$dE_\lambda(L_0)f = \frac{1}{2\pi i}\big(R_{\lambda-i0}(L_0) - R_{\lambda+i0}(L_0)\big)f\,d\lambda$$

и учитывая, что $R_{\lambda-i0}(\Delta_{\mathbb{Z}}) - R_{\lambda+i0}(\Delta_{\mathbb{Z}}) = 0$ при $\lambda\notin\sigma(\Delta_{\mathbb{Z}})$, получим для указанных λ плотность спектральной функции оператора L_0

$$\begin{aligned} dE_\lambda(L_0)f(l,j) = \frac{1}{4\pi}\sum_{q=1}^{n}\frac{\psi_q(l)}{\sin[k(\lambda-\nu_q)]}\theta(\lambda-\nu_q)\times\\ \times\sum_{p=1}^{n}\sum_{m\in\mathbb{Z}}\Big\{\big[f(p,m)\cdot e^{ik(\lambda-\nu_q)m}\cdot\psi_q(p)\big]e^{-ik(\lambda-\nu_q)j} +\\ +\big[f(p,m)\cdot e^{-ik(\lambda-\nu_q)m}\cdot\psi_q(p)\big]e^{ik(\lambda-\nu_q)j}\Big\}d\lambda. \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь мы ввели обозначение

$$\theta(\mu) = \begin{cases} 1, & \text{если } \mu\in[0,4];\\ 0, & \text{если } \mu\in\mathbb{R}\setminus[0,4]. \end{cases} \tag{5}$$

2.4. Спектральное представление оператора L_0

Пусть Ω — декартово произведение двухточечного множества $\{+,-\}$ на множество целых чисел, лежащих на отрезке от единицы до n. Превратим Ω в пространство с мерой dw, приписав каждой его точке меру $+1$.

Определение. h — гильбертово пространство функций на отрезке $[\nu_1, \nu_n+4]$ со значениями в $L^2(\Omega, dw)$, таких что

$$\big(\{f(\lambda,\pm,q)\}\in h\big)\Rightarrow\big(\operatorname{spt} f(\lambda,\pm,q)\subset[\nu_q,\nu_q+4]\big),$$
$$(f,g)_h=\int\limits_{\sigma(L_0)}\left(\int\limits_{\Omega}\overline{f(\lambda,w)}g(\lambda,w)\,dw\right)d\lambda.$$

Лемма 2. *Преобразование* $U\colon H\mapsto h$,

$$(Uf)(\lambda,\pm,q)=(4\pi\sin[k(\lambda-\nu_q)])^{-1/2}\times$$
$$\times\sum_{p=1}^{n}\sum_{m\in\mathbb{Z}}\left[f(p,m)\cdot e^{\mp ik(\lambda-\nu_q)m}\cdot\psi_q(p)\cdot\theta(\lambda-\nu_q)\right]$$

унитарно, и обратное преобразование дается формулой

$$U^{-1}\colon f(l,j)=\int\limits_{\sigma(L_0)}\sum_{q=1}^{n}(4\pi\sin[k(\lambda-\nu_q)])^{-1/2}\times$$
$$\times\Big[(Uf)(\lambda,+,q)\cdot e^{ik(\lambda-\nu_q)j}\cdot\psi_q(l)+$$
$$+(Uf)(\lambda,-,q)\cdot e^{-ik(\lambda-\nu_q)j}\cdot\psi_q(l)\Big]d\lambda.$$

В пространстве h оператор L_0 является оператором домножения на λ.

Доказательство. Используя известные свойства разложения единицы (см., напр., [9])

$$f=\int\limits_{\sigma(L_0)}dE_\lambda(L_0)f,\quad \|f\|^2=\int\limits_{\sigma(L_0)}\langle f,dE_\lambda(L_0)f\rangle_H$$

и принимая во внимание представление (4), устанавливаем верность первого утверждения леммы.

Второе утверждение является следствием того легко проверяемого факта, что

$$(\lambda-L_0)\left[e^{ik(\lambda-\nu_q)j}\psi_q(l)\right]=0. \qquad \square$$

3. Задача рассеяния

Везде далее будем считать, что $a>0$. Введем следующее обозначение:

$$e_q(\pm,\lambda,l,j)=e^{\pm ik(\lambda-\nu_q)j}\cdot\psi_q(l)\cdot\theta(\lambda-\nu_q).$$

Элементы пространства H_a, определяемые функциями $e_q(\pm,\lambda,l,j)$, будем соответственно обозначать $e_q(\pm,\lambda)$.

Набор элементов $\{u_q(\pm,\lambda)\}\subset H_a$, где $1\leqslant q\leqslant n$, мы назовем решением задачи рассеяния, если

$$\lambda\in\sigma(L_0)\setminus\{\nu_q,\nu_q+4\},$$

удовлетворяются уравнения

$$Lu_q(\pm,\lambda)=\lambda u_q(\pm,\lambda), \tag{6}$$

и справедливо представление

$$u_q(\pm,\lambda)=e_q(\pm,\lambda)+w_q(\pm,\lambda), \tag{7}$$

где $w_q(\pm,\lambda)$ удовлетворяют условиям излучения:

$$\begin{aligned}
w_q(+,\lambda,l,j)&=\sum_{s=1}^{n}(t(+,s,q,\lambda)-\delta_{sq})e_s(+,\lambda,l,j)+\\
&\qquad+o(\ldots)\ \text{ при } j>0,\\
w_q(+,\lambda,l,j)&=\sum_{s=1}^{n}r(+,s,q,\lambda)e_s(-,\lambda,l,j)+o(\ldots)\\
&\qquad\text{при } j<0,\\
w_q(-,\lambda,l,j)&=\sum_{s=1}^{n}r(-,s,q,\lambda)e_s(+,\lambda,l,j)+o(\ldots)\\
&\qquad\text{при } j>0,\\
w_q(-,\lambda,l,j)&=\sum_{s=1}^{n}(t(-,s,q,\lambda)-\delta_{sq})e_s(-,\lambda,l,j)+\\
&\qquad+o(\ldots)\ \text{ при } j<0,
\end{aligned} \tag{8}$$

и $o(\ldots)$ означает, что

$$\exists\,\delta>0\colon o(\ldots)=O(\exp(-\delta|j|))\ \text{ при } |j|\to\infty.$$

Коэффициенты $t(\pm,s,q,\lambda)$ и $r(\pm,s,q,\lambda)$ будем называть коэффициентами прохождения и отражения соответственно.

Лемма 3. *Если $w_q(\pm,\lambda)$ удовлетворяет условиям излучения* (8), *то* $\forall\, l,j$

$$\varepsilon R_{\lambda+i\varepsilon}(L_0)w_q(\pm,\lambda,l,j)\to 0,\quad \textit{при } \varepsilon\to+0.$$

Доказательство. Утверждение проверяется непосредственной выкладкой. $\square$

Положим

$$\Gamma(\lambda)=R_\lambda(L_0)V,\quad \operatorname{Im}\lambda>0,\quad \operatorname{Re}\lambda\in\sigma(L_0)\setminus\{\nu_q,\nu_q+4\}.$$

Лемма 4. *Если оператор V удовлетворяет условиям леммы 1, то $\Gamma(\lambda)$ суть компактные в H_a операторы при указанных λ. При $\lambda\in\sigma(L_0)\setminus\{\nu_q,\nu_q+4\}$ существуют также компактные в H_a операторы* $\Gamma(\lambda+i0)$.

Доказательство. Первое утверждение очевидно. Для доказательства второго нужно воспользоваться тем, что $\Gamma(\lambda)$ сходятся по норме. $\square$

Лемма 5. *Набор $\{u_q(\pm,\lambda)\}$ является решением задачи рассеяния в том и только в том случае, когда $w_q(\pm,\lambda)$ в* (7) *является (для каждого q) решением уравнения*

$$w_q(\pm,\lambda)=\Gamma(\lambda+i0)(e_q(\pm,\lambda)+w_q(\pm,\lambda)). \tag{9}$$

Доказательство. Пусть $\{u_q(\pm,\lambda)\}$ — решение задачи рассеяния. Тогда из уравнения (6) следует

$$(\lambda-L_0)w_q(\pm,\lambda)=V(e_q(\pm,\lambda)+w_q(\pm,\lambda))$$

и

$$w_q(\pm,\lambda)-i\varepsilon R_{\lambda+i\varepsilon}(L_0)w_q(\pm,\lambda)=$$
$$=R_{\lambda+i\varepsilon}(L_0)V(e_q(\pm,\lambda)+w_q(\pm,\lambda)).$$

Переходя здесь к пределу при $\varepsilon\to+0$ и учитывая леммы 3 и 4, получим (9).

Если $w_q(\pm,\lambda)$ — решение уравнения (9), то она удовлетворяет условиям излучения, что следует из явного вида $R_{\lambda+i0}(L_0)$. Так как выполнено

$$(\lambda-L_0)\Gamma(\lambda+i0)=V,$$

то из (9) следует (6). $\square$

Лемма 6. *При* $\lambda \in \sigma(L_0) \setminus \{\nu_q, \nu_q+4\}$ *решение уравнения*

$$\phi = \Gamma(\lambda + i0)\phi, \quad \phi \in H_a, \tag{10}$$

принадлежит H *и удовлетворяет уравнению* (6).

Доказательство. Вторая часть утверждения очевидна. Для доказательства первой нужно заметить, что решение уравнения (10) необходимо имеет вид

$$\phi(l,j) = \sum_{q=1}^{n} C_q^{(\pm)} \cdot e^{ik(\lambda-\nu_q)|j|} \cdot \psi_q(l) \cdot \theta(\lambda - \nu_q) + \\ + O(e^{-|j|}) \quad \text{при } j \to \pm\infty,$$

и показать, что $C_q^{(\pm)}$ все равны нулю. □

Теорема 1. *При* $\lambda = \lambda_0 \in \sigma(L_0) \setminus \{\nu_q, \nu_q+4\}$ *либо уравнение* (10) *имеет нетривиальное решение из* H, *либо решение задачи рассеяния существует и единственно.*

Доказательство. Оператор $\Gamma(\lambda + i0)$ является компактным в H_a. Применяя к оператору $1 - \Gamma(\lambda + i0)$ альтернативу Фредгольма в пространстве H_a и учитывая леммы 5 и 6, получаем утверждение теоремы. □

Пусть $\sigma_d(L)$ — множество тех значений λ, при которых уравнение (6) имеет нетривиальное решение из H. Из утверждения леммы 6 следует, что при $\lambda \notin \sigma_d(L)$ уравнение (10) не может иметь нетривиальных решений. И значит при данных λ решение задачи рассеяния существует и единственно. Одновременно с этим существуют и операторы $R_{\lambda+i0}(L)$, ограниченные при действии из H_{-a} в H_a.

Лемма 7. *При* $\lambda \notin \sigma_d(L)$ *решение уравнения* (9) *дается формулой*

$$w_q(\pm,\lambda) = R_{\lambda+i0}(L)Ve_q(\pm,\lambda). \tag{11}$$

Доказательство. Обозначим правую часть (11) через $\widetilde{w_q(\pm,\lambda)}$ и докажем, что она удовлетворяет уравнению (9). Имеем

$$\Gamma(\lambda + i0)(e_q(\pm,\lambda) + \widetilde{w_q(\pm,\lambda)}) = \\ = R_{\lambda+i0}(L_0)Ve_q(\pm,\lambda) + R_{\lambda+i0}(L_0)VR_{\lambda+i0}(L)Ve_q(\pm,\lambda) = \\ = [R_{\lambda+i0}(L_0) + R_{\lambda+i0}(L_0)VR_{\lambda+i0}(L)]Ve_q(\pm,\lambda) = \\ = R_{\lambda+i0}(L)Ve_q(\pm,\lambda) = \widetilde{w_q(\pm,\lambda)}.$$

Так как решение уравнения (9) единственно, то лемма доказана. □

4. Матрица рассеяния

Определим оператор $Z(\varepsilon)$:

$$Z(\varepsilon)\colon l(\mathbb{S}_n)\otimes l(\mathbb{Z}) \mapsto l(\mathbb{S}_n)\otimes l(\mathbb{Z}), \quad Z(\varepsilon)f(l,j) = e^{-\varepsilon|j|}f(l,j).$$

Прямым вычислением доказывается следующая лемма.

Лемма 8. *Справедливо равенство*

$$(\lambda - L_0)Z(\varepsilon)e_q(\pm,\lambda,l,j) = \\ = \mp 2i \sin k(\lambda-\nu_q)\varepsilon\,\mathrm{sign}(j) e_q(\pm,\lambda,l,j)e^{-\varepsilon|j|} + O(\varepsilon^2 e^{-\varepsilon|j|}).$$

Определим оператор

$$T(\lambda)\colon H_a \mapsto H_a, \quad T(\lambda) = V + VR_\lambda(L)V, \quad \operatorname{Im}\lambda > 0.$$

Если $\lambda \notin \sigma_d(L)$, то существует $T(\lambda + i0)$.

Лемма 9. *При* $\lambda \notin \sigma_d(L)$ *справедливо равенство*

$$T(\lambda + i0)e_q(\pm,\lambda) = (\lambda - L_0)w_q(\pm,\lambda).$$

Доказательство. Учитывая (11) и (6), имеем

$$T(\lambda + i0)e_q(\pm,\lambda) = Ve_q(\pm,\lambda) + VR_{\lambda+i0}(L)Ve_q(\pm,\lambda) = \\ = Ve_q(\pm,\lambda) + Vw_q(\pm,\lambda) = (L - L_0)(e_q(\pm,\lambda) + w_q(\pm,\lambda)) = \\ = (\lambda - L_0)(e_q(\pm,\lambda) + w_q(\pm,\lambda)) = (\lambda - L_0)w_q(\pm,\lambda). \quad \square$$

Определим волновые операторы и оператор рассеяния:

$$W_\pm(L,L_0) = \lim_{t\to\pm\infty} e^{itL}e^{-itL_0}, \\ S(L,L_0) = W_+{}^*(L,L_0)W_-(L,L_0).$$

Существование и полнота волновых операторов следует из вида оператора V. Как известно (см., напр., [10]), оператор рассеяния $S(L,L_0)$ коммутирует с оператором L_0 и поэтому в пространстве h задается матрицей

$$(US(L,L_0)f)(\lambda) = S(L,L_0,\lambda)(Uf)(\lambda) \tag{12}$$

Введем обозначение $\theta_{qs} = \theta(\lambda - \nu_q)\theta(\lambda - \nu_s)$, где $\theta(\mu)$ определяется формулой (5).

Теорема 2. *Если* $\lambda \notin \{\nu_q, \nu_q+4\}$ *и* $\lambda \notin \sigma_d(L)$, *то матрица рассеяния в* (12) *выражается через коэффициенты прохождения и отражения следующим образом:*

$$\begin{pmatrix} t(+,1,1,\lambda)\theta_{11} & \dots & t(+,1,n,\lambda)\theta_{1n} & r(-,1,1,\lambda)\theta_{11} & \dots & r(-,1,n,\lambda)\theta_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t(+,n,1,\lambda)\theta_{n1} & \dots & t(+,n,n,\lambda)\theta_{nn} & r(-,n,1,\lambda)\theta_{n1} & \dots & r(-,n,n,\lambda)\theta_{nn} \\ r(+,1,1,\lambda)\theta_{11} & \dots & r(+,1,n,\lambda)\theta_{1n} & t(-,1,1,\lambda)\theta_{11} & \dots & t(-,1,n,\lambda)\theta_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r(+,n,1,\lambda)\theta_{n1} & \dots & r(+,n,n,\lambda)\theta_{nn} & t(-,n,1,\lambda)\theta_{n1} & \dots & t(-,n,n,\lambda)\theta_{nn} \end{pmatrix}.$$

Доказательство. Как известно (см., напр., [10, гл. 2, разд. 8, формула 9]), вычисление матрицы рассеяния сводится к вычислению матричных элементов оператора $T(\lambda + i0)$ между функциями $e_q(\pm,\lambda)$. Найдем матричный элемент

$$\langle e_q(+,\lambda), T(\lambda + i0)e_s(+,\lambda)\rangle_H = \\ = \langle e_q(+,\lambda), (\lambda - L_0)w_s(+,\lambda)\rangle_H = \\ = \lim_{\varepsilon\to+0} \langle Z(\varepsilon)e_q(+,\lambda), (\lambda - L_0)w_s(+,\lambda)\rangle_H = \\ = \lim_{\varepsilon\to+0} \langle (\lambda - L_0)Z(\varepsilon)e_q(+,\lambda), w_s(+,\lambda)\rangle_H = \\ = 2i\sin[k(\lambda - \nu_q)](t(+,q,s,\lambda) - \delta_{qs})\theta(\lambda - \nu_q)\theta(\lambda - \nu_s).$$

Остальные матричные элементы находятся аналогично.

Введение предельной процедуры здесь оправданно, поскольку $(\lambda - L_0)w_s(\pm, \lambda, l, j)$ быстро убывает при больших $|j|$. Учитывается лемма 8, а для $w_s(\pm, \lambda, l, j)$ используется представление (8). Члены с $o(\ldots)$ и $O(\varepsilon^2 e^{-\varepsilon|j|})$ зануляются при $\varepsilon \to +0$. Перекрестные суммы при $q \neq s$ зануляются ввиду ортогональности собственных функций оператора A. После этого остаются только две суммы по j. В одной из них присутствует осциллирующая функция, в другой — нет. После взятия предела при $\varepsilon \to +0$ первая зануляется, а вторая дает нужный коэффициент. □

Заключение

Отметим, что в формулировке теоремы 2 исключены из рассмотрения точки множеств $\{\nu_q, \nu_q + 4\}$ и $\sigma_d(L)$. Тем не менее первое из них конечно (содержит $2n$ элементов), а второе не более чем счетно (так как все собственные функции дискретного спектра оператора L, лежащие в H, попарно ортогональны, а само H при этом сепарабельно). Таким образом, абстрактная матрица рассеяния в нашем случае действительно состоит из коэффициентов прохождения и отраженния для всех значений спектрального параметра, за исключением самое бо́льшее счетного их числа.

Список литературы

1. *Maiti S.K.* // Solid State Communications. 2009. **149**, N 39–40. P. 1684.
2. *Pereira V.M., Castro Neto A.H., Peres N.M.R.* // Phys. Rev. B. 2009. **80**, N 4. P. 045401.
3. *Wimmer M., Scheid M., Richter K.* // 2005. arXiv:cond-mat/0803.3705.
4. *Buttiker M., Imry Y., Landauer R., Pinhas S.* // Phys. Rev. B. 1985. **31**, N 10. P. 6207.
5. *Datta S.* Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge, 2002.
6. *Хёрмандер Л.* Анализ линейных дифференциальных операторов с частными производными. М., 1986.
7. *Арсеньев А.А.* // ТМФ. 2004. **141**, № 1. С. 100.
8. *Komech A.I., Kopylova E.A., Kunze M.* // Applicable Analysis. 2006. **85**, N 12. P. 1487.
9. *Ахиезер Н.И., Глазман И.М.* Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. М., 1966.
10. *Яфаев Д.Р.* Математическая теория рассеяния. СПб., 1994.

Scattering problem in quantum waveguide in a tight-binding model

I. A. Ado

Department of Mathematics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.
E-mail: ado@matematika.phys.msu.ru.

Scattering problem in quantum waveguide is considered within a tight-binding approach. Relation between the stationary and time-dependent definitions of S-matrix is established.

Keywords: S-matrix, quantum waveguide, tight-binding model.
PACS: 03.65.Nk, 73.21.Hb, 73.23.Ad.
Received 14 April 2010.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 5(2010).

Сведения об авторе

Адо Иван Андреевич — аспирант; e-mail: ado@matematika.phys.msu.ru.