

Spektrum kvantových grafů

Jiří Lipovský

verze 1.1

1 Úvod

Následující text popisuje způsob hledání vlastních hodnot energie pro konkrétní příklady kvantových grafů. Měl by sloužit především studentům předmětu Seminář matematické fyziky 1 (PSMF1) na Univerzitě Hradec Králové. Mohou se v něm vyskytovat některé chyby; autor ocení, když jej na chyby a nejasnosti upozorníte na emailu jiri.lipovskyzavináčuhk.cz.

2 Popis modelu

Uvažujeme metrický graf Γ , který se skládá z množiny vrcholů \mathcal{V} a množiny hran \mathcal{E} , které spojují tyto vrcholy. V tomto textu budeme uvažovat pouze vnitřní hrany o konečných délkách ℓ_j . Hrany mohou být parametrizovány intervaly $(0, \ell_j)$. Na grafu definujeme operátor (hamiltonián) H , který na hranách působí jako $-\frac{d^2}{dx^2}$. Definičním oborem hamiltoniánu jsou funkce ze Sobolevova prostoru $W^{2,2}(\Gamma)$. Zjednodušeně řečeno, jsou to funkce, pro které existuje první a druhá derivace a jak komponenty těchto funkcí na jednotlivých hranách, tak jejich první a druhé derivace jsou kvadraticky integrabilní, tj. integrál $\int_0^{\ell_j} |f_j(x)|^2 dx$ je konečný. Další podmínkou toho, aby funkce náležela do definičního oboru hamiltoniánu, je, že splňuje vazebné podmínky v jednotlivých vrcholech grafu. Ty jsou obecně dány rovnicí

$$(U_j - I)\Psi_j + i(U_j + I)\Psi'_j = 0,$$

kde pro každý vrchol je definovaná unitární matice U_j typu $d_j \times d_j$ (d_j je počet hran vycházejících z daného vrcholu; unitarita znamená, že $U_j U_j^\dagger = I$; zde \dagger znamená komplexní sdružení a transpozici matice), I je $d_j \times d_j$ jednotková matice, Ψ_j je vektor, jehož složky jsou limity funkčních hodnot z jednotlivých hran do daného vrcholu a Ψ'_j je vektor limit vycházejících derivací (pokud je hrana parametrizována tak, že $x = 0$ odpovídá danému vrcholu, bereme $f'_j(0)$, pokud vrcholu odpovídá $x = \ell_j$, bereme $-f'_j(\ell_j)$).

Uvedeme nejběžnější příklady vazebných podmínek.

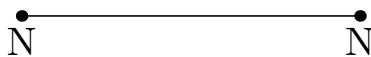
- Dirichletova podmínka. Pro všechny hrany v daném vrcholu v uvažujeme podmínku

$$f_j(v) = 0.$$

To znamená, že efektivně je ve vrcholu graf rozpojený a jednotlivé hrany „o sobě neví“. Odpovídající unitární matice je $U = -I$.

- Neumannova podmínka. Pro všechny hrany v daném vrcholu v uvažujeme podmínku

$$f'_j(v) = 0.$$



Obrázek 1: Úsečka s Neumannovými podmínkami

I v tomto případě je graf ve vrcholu rozpojený. Odpovídající unitární matice je $U = I$.

- δ -podmínka. Funkce ve vrcholu splňují podmínku

$$f_i(v) = f_j(v) \equiv f(v),$$

$$\sum_{j=1}^{d(v)} f'_j(v) = \alpha f(v).$$

Funkce jsou tedy v daném vrcholu spojité a suma vycházejících derivací (zde je opět nutné brát $f'_j(0)$ a $-f'_j(\ell_j)$) je rovna násobku této funkční hodnoty. Konstanta α je dané reálné číslo.

- Standardní podmínka (též zvaná Kirchhoffova). Jde o δ -podmínku s hodnotou síly interakce $\alpha = 0$, tj. funkce jsou spojité ve vrcholu a suma vycházejících derivací je nulová.

3 Úsečka s Neumannovými podmínkami

Uvažujeme úsečku o délce ℓ s Neumannovými podmínkami v obou krajních vrcholech (viz obr. 1). Úsečka je parametrizována $x \in (0, \ell)$. Podmínka na vlastní čísla hamiltoniánu (energie, které můžeme v kvantové fyzice naměřit) je $Hf = Ef$ (nečasová Schrödingerova rovnice). Pro energii si zvolíme substituci $E = k^2$. Takže dostáváme diferenciální rovnici

$$-\frac{d^2}{dx^2} f(x) = k^2 f(x).$$

To je homogenní diferenciální rovnice s konstantními koeficienty, která se řeší substitucí $f(x) = e^{\lambda x}$, kde λ je komplexní konstanta. Díky $f''(x) = \lambda^2 e^{\lambda x}$ máme

$$(\lambda^2 + k^2)e^{\lambda x} = 0;$$

protože exponenciála se nerovná nikdy nule, dostáváme $\lambda = \pm ik$. Tedy obecné řešení rovnice je lineární kombinací funkcí e^{ikx} a e^{-ikx} :

$$f(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx}.$$

Díky Moivreově větě $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$ můžeme psát

$$f(x) = a \cos kx + ai \sin kx + b \cos kx - bi \sin kx = A \cos kx + B \sin kx,$$

kde A a B jsou nové komplexní konstanty. Odsud

$$f'(x) = -Ak \sin kx + Bk \cos kx .$$

Vazebné podmínky jsou

$$f'(0) = 0, \quad f'(\ell) = 0 .$$

Z první z nich máme díky tomu, že $\sin 0 = 0$ a $\cos 0 = 1$,

$$f'(0) = Bk = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0 ,$$

z druhé podmínky

$$f'(\ell) = -Ak \sin k\ell + Bk \cos k\ell = 0 .$$

S využitím $B = 0$ a toho, že $A \neq 0$ (protože pak by funkce byla identicky nulová) máme

$$\sin k\ell = 0 \quad \Rightarrow \quad k\ell = n\pi, \quad n \in \mathbb{N} .$$

Proto dostáváme vlastní energie

$$E_n = \left(\frac{n\pi}{\ell} \right)^2 .$$

Odpovídající vlastní funkce jsou

$$f_n(x) = A_n \cos k_n x = A_n \cos \frac{n\pi x}{\ell} .$$

Dále musíme zahrnout vlastní energii $E_0 = 0$ odpovídající $k = 0$ s konstantní vlastní funkcí

$$f_0(x) = C_n .$$

4 Kružnice o délce ℓ .

Uvažujme kružnici o délce ℓ (viz obr. 2). Na kružnici můžeme představit nový vrchol se standardní podmínkou. Tato podmínka předepíše, že jak funkční hodnota, tak derivace jsou spojité v tomto vrcholu. Tudiž nepřináší žádné omezení. Kružnice je parametrizovaná intervalem $(0, \ell)$. Nečasová Schrödingerova rovnice je opět

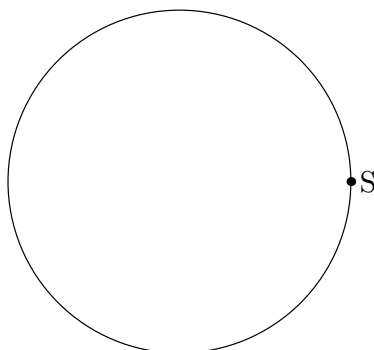
$$-f''(x) = k^2 f(x) ,$$

její obecné řešení je jako v předchozím příkladě

$$f(x) = A \cos kx + B \sin kx ,$$

jeho derivace je

$$f'(x) = -Ak \sin kx + Bk \cos kx .$$



Obrázek 2: Kružnice o délce ℓ .

Vazebná podmínka v nově vytvořeném vrcholu je

$$f(0) = f(\ell), \quad f'(0) - f'(\ell) = 0.$$

Dosažením obecného řešení dostáváme

$$\begin{aligned} A &= A \cos k\ell + B \sin k\ell, \\ Bk &= -Ak \sin k\ell + Bk \cos k\ell. \end{aligned}$$

Vyloučíme-li případ $k = 0$, můžeme tuto soustavu rovnic zapsat jako

$$\begin{pmatrix} \cos k\ell - 1 & \sin k\ell \\ -\sin k\ell & \cos k\ell - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

Tato soustava má řešení, pouze pokud je determinant matice výše nulový. Tím dostáváme podmínku

$$(\cos k\ell - 1)^2 + \sin^2 k\ell = 0.$$

Odsud

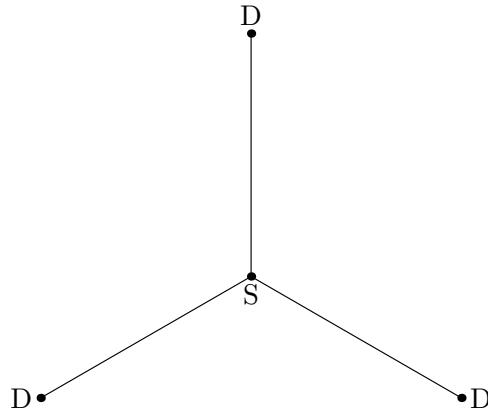
$$\begin{aligned} \cos^2 k\ell + \sin^2 k\ell - 2 \cos k\ell + 1 &= 0, \\ 2 - 2 \cos k\ell &= 0, \\ \cos k\ell = 0 &\Rightarrow k\ell = 2n\pi, \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Odsud máme pro vlastní energie

$$E_n = \left(\frac{2n\pi}{\ell} \right)^2.$$

Tyto vlastní hodnoty mají násobnost 2. Pro každé n je matice před vektorem $(A, B)^T$ identicky nulová, proto existují vždy dvě lineárně nezávislé vlastní funkce

$$f_{1n}(x) = A_n \cos \frac{2n\pi x}{\ell}, \quad f_{2n}(x) = B_n \sin \frac{2n\pi x}{\ell}.$$



Obrázek 3: Stromový graf se standardní podmínkou a Dirichletovými podmínkami.

Dále musíme zahrnout vlastní energii $E_0 = 0$ odpovídající $k = 0$ s konstantní vlastní funkcí

$$f_0(x) = C_n .$$

5 Stromový graf se třemi hranami

Uvažujme stromový graf se třemi hranami (viz obr. 3); všechny hrany jsou spojeny v jednom vrcholu, ve kterém je standardní podmínka. Na zbylých třech vrcholech uvažujeme Dirichletovu podmínku. Hrany jsou parametrizovány intervaly $(0, \ell_j)$ s $x = 0$ ve vrcholech s Dirichletovou podmínkou a $x = \ell_j$ ve středním vrcholu.

Dostáváme stejnou nečasovou Schrödingerovu rovnici jako v předchozích dvou případech. Její obecné řešení je ve tvaru

$$f_j(x) = A_j \cos kx + B_j \sin kx .$$

Z Dirichletovy podmínky máme

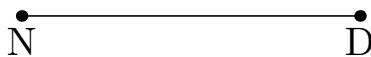
$$f_j(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_j = 0 .$$

Proto

$$\begin{aligned} f_j(x) &= B_j \sin kx , \\ f'_j(x) &= B_j k \cos kx . \end{aligned}$$

Standardní podmínka ve středním vrcholu dává

$$\begin{aligned} f_1(\ell_1) &= f_2(\ell_2) = f_3(\ell_3) , \\ -f'_1(\ell_1) - f'_2(\ell_2) - f'_3(\ell_3) &= 0 . \end{aligned}$$



Obrázek 4: Úsečka s Neumannovou a Dirichletovou podmínkou.

Po dosazení výrazů pro funkční hodnotu a derivaci a po vydělení druhé rovnice $-k$ dostáváme

$$\begin{aligned} B_1 \sin k\ell_1 &= B_2 \sin k\ell_2 = B_3 \sin k\ell_3, \\ B_1 \cos k\ell_1 + B_2 \cos k\ell_2 + B_3 \cos k\ell_3 &= 0. \end{aligned}$$

Tuto soustavu rovnic lze zapsat jako

$$\begin{pmatrix} \sin k\ell_1 & -\sin k\ell_2 & 0 \\ \sin k\ell_1 & 0 & -\sin k\ell_3 \\ \cos k\ell_1 & \cos k\ell_2 & \cos k\ell_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} = 0.$$

Determinant předchozí matice dává podmínku

$$\sin k\ell_1 \sin k\ell_2 \cos k\ell_3 + \sin k\ell_1 \sin k\ell_3 \cos k\ell_2 + \sin k\ell_2 \sin k\ell_3 \cos k\ell_1 = 0.$$

To je podmínka, ze které můžeme (například numericky) najít k a poté určit vlastní energie.

Pokud budou délky všech hran stejné $\ell_1 = \ell_2 = \ell_3 \equiv \ell$, můžeme vlastní energie určit analyticky. Podmínka bude

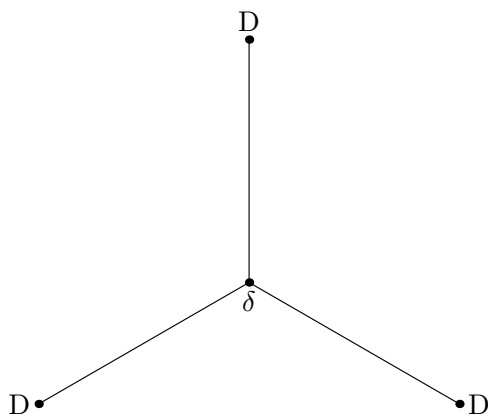
$$\sin^2 kl \cos kl = 0.$$

Tomu odpovídá $kl = n\pi$, tedy $E_n = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2$ s násobností 2 a $kl = \frac{\pi}{2} + n\pi$, tedy $E_n = \left[\frac{\pi}{\ell} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2$ s násobností 1. Vlastní energie $E = 0$ s konstantní vlastní funkcí na grafu zde v tomto případě není, protože by tato konstanta musela být kvůli Dirichletovým podmínkám nulová, tudíž by vlastní funkce byla identicky nulová.

6 Příklady k samostatnému procvičování

Příklad 6.1. Určete vlastní energie pro případ úsečky délky ℓ s Neumannovou podmínkou na jednom konci a Dirichletovou na druhém (viz obr. 4).

Příklad 6.2. Určete podmínku na vlastní energie (energie nemusíte dopočítávat) pro případ stromového grafu se třemi hranami spojenými v jednom bodě, δ -podmínkou v tomto bodě a Dirichletovými podmínkami v ostatních vrcholech (viz obr. 5).



Obrázek 5: Stromový graf s δ -podmínkou a Dirichletovou podmínkou.

7 Výsledky příkladů k samostatnému procvičování

6.1 $E_n = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{\ell} \right]^2, n \in \mathbb{N}.$

6.2

$$\sin kl_1 \sin kl_2 \cos kl_3 + \sin kl_1 \sin kl_3 \cos kl_2 + \sin kl_2 \sin kl_3 \cos kl_1 + \alpha \sin kl_1 \sin kl_2 \sin kl_3 = 0.$$

8 Použitá a doporučená literatura

- [1] G. Berkolaiko, P. Kuchment, *Introduction to Quantum Graphs*, Mathematical Surveys and Monographs 186. AMS, 2013, 270 pp.
- [2] J. Lipovský, Rezonance v kvantových grafech, Čs. čas. fyz. 64 (2014), no. 6., p. 353 – 356, dostupné z [www: http://lide.uhk.cz/prf/ucitel/lipovji1/papers/rezonance_v_kvantovych_grafech-cs_cas_fyz14-preprint.pdf](http://lide.uhk.cz/prf/ucitel/lipovji1/papers/rezonance_v_kvantovych_grafech-cs_cas_fyz14-preprint.pdf)