Rezonance v kvantových grafech

Jiří Lipovský
Katedra fyziky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Hradec Králové, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové; jiri.lipovsky@uhk.cz

V tomto článku shrnujeme výsledky o rezonancích v kvantových grafech. Nejdříve představíme pojem kvantového grafu. Poté rozlišíme dvě definice rezonancí – rezolventní a rozptylové rezonance. Dále studujeme vlastní čísla hamiltoniánu grafu, který má délky hran v racionálním poměru, a rezonance, které vzniknou, když tuto racionalitu porušíme. Nakonec představíme asymptotiku počtu rezonancí a ukážeme kritéria, kdy je asymptotika neweylovská.

Úvod a zavedení problému

Kvantové grafy jsou úspěšným modelem, který se rozvíjí hlavně poslední tři desetiletí. Myšlenka umístit kvantovou částici na graf je však ještě starší. Poprvé byla použita Paulingem v roce 1936 [1] pro výpočet diamagnetických vlastností aromatických molekul a Ruedenbergem a Scherrem v roce 1953 [2] pro popis π-elektronů v těchto molekulách. Model, který bere nekonečně tenké kvantové dráty a vytvoří z nich graf, není jen matematickou hříčkou. Měření jejich spektrálních a rezonančních vlastností lze provést například pomocí mikrovln; provádí je tak třeba varšavská skupina [3].

Z matematického pohledu je model kvantových grafů poměrně jednoduchý. Jedná se o systém obyčejných diferenciálních rovnic spojených vazebnými podmínkami ve vrcholech. Základem je metrický graf Γ, skládající se z N vnitřních hran o délkách l_j a M vnějších (nekonečných) hran – polopřímek. Hilbertův prostor systému se skládá z kvadraticky integrovatelných funkcí na všech hranách

$$H = \oplus_{i=1}^{N} L^2((0,l_i)) \oplus \oplus_{i=1}^{M} L^2((0,\infty)). \qquad (1)$$

Systém je popsán hamiltoniánem, který působí jako $-d^2/dx^2 + V(x)$ kde $V(x)$, je potenciál s nosičem pouze na vnitřních hranách grafu. Tento vztah odpovídá hamiltoniánu kvantové částice v soustavě jednotek, kde ħ = 1, m = ½. Definiční obor tohoto hamiltoniánu je Sobolevův prostor $W^{2,2}(\Gamma)$, tj. ortogonální suma Sobolevových prostorů na jednotlivých hranách. Sobolevův prostor $W^{k,p}$ je množina všech funkcí, jejichž všechny slabé parciální derivace do řádu k včetně leží v L^p na daném intervalu. Zároveň musejí tyto funkce splňovat vazebné podmínky v každém vrcholu

$$(U_j - I)\Psi_j + i(U_j + I)\Psi_j' = 0\,, \qquad (2)$$

kde Ψ_j je vektor limit funkčních hodnot v j-tém vrcholu při blížení se z jednotlivých hran vycházejících z tohoto vrcholu, Ψ_j' je vektor derivací vycházejících z tohoto vrcholu, U_j je $d \times d$ unitární matice (d je počet sousedů daného vrcholu), I jednotková matice stejného rozměru a i je komplexní jednotka. Tyto vazebné podmínky pro kvantové grafy poprvé na sobě nezávisle popsali Harmer [4] a Kostrykin se Schraderem [5], myšlenka byla ovšem už dříve známá v teorii samosdružených rozšíření.

Existuje také jednoduchý způsob, jak vazebné podmínky ve všech vrcholech grafu popsat jednou velkou unitární maticí. Všechny vrcholy grafu se spojí do jednoho a zavede se unitární matice U, která je po „přeházení“ určitých sloupců a řádků blokově diagonální s bloky odpovídajícími původním vrcholovým vazebným maticím. Tato velká unitární matice U tak popisuje nejen vazebné podmínky, ale i topologii celého grafu. Kdybychom matici U nezvolili v určité bázi blokově diagonální, popisovala by i situaci, kdy částice „přeskakuje“ mezi jednotlivými vrcholy.

Dále se nám bude hodit zavést efektivní energeticky závislé vazebné matice, které popisují vazbu na vnitřní části grafu (po odpojení všech polopřímek). Nechť se matice U skládá z bloků U_1, U_2, U_3, U_4, kde U_1 odpovídá vazbě mezi vnitřními hranami grafu, U_4 vazbě mezi polopřímkami a U_2 a U_3 vazbám mezi vnitřními hranami a polopřímkami. Pro M vnitřních hran a N polopřímek nakonec dostáváme efektivní vazebnou matici

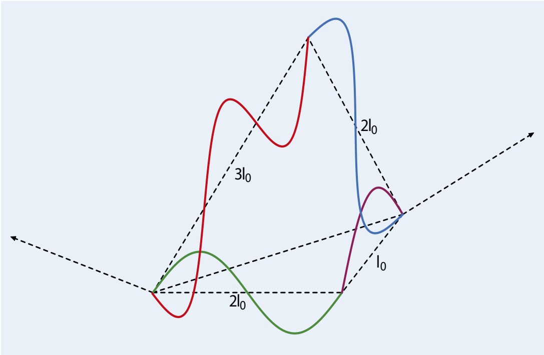
$$U_{ef}(k) = U_1 - I_{2N} - (1-k)U_2[(1-k)U_4 - (1+k)I_M]^{-1}U_3, \qquad (3)$$

kde I značí jednotkovou matici a dolní index udává její velikost, k je odmocnina z energie. Vazebná podmínka je pak dána rovnicí (2), kde místo U_j je U_{ef}.

Rezonance

Rezonance budeme chápat jako čísla v komplexní rovině. Kdybychom uvažovali časově závislý případ, částice by se při průchodu grafem „zdržela“ v jeho vnitřní části déle pro energie, které odpovídají reálným částem těchto komplexních čísel. Doba života částice ve vnitř-

» Matice rozptylu je nevidí. «



Obr. 1 Ilustrace vlastní funkce.

ní části grafu by byla tím vyšší, čím jsou tyto rezonance blíže reálné ose.

Existují dvě hlavní definice rezonancí – póly rezolventy a póly matice rozptylu. *Rezolventní rezonance* jsou póly analytického prodloužení tzv. rezolventy, tj. operátoru $(H - \lambda id)^{-1}$, kde H je hamiltonián a id identický operátor. V případě kvantových grafů je komplexní energie $E = k^2$ rezolventní rezonancí, jestliže existuje řešení nečasové Schrödingerovy rovnice s asymptotikou typu e^{ikx} na všech polopřímkách. Elegantním způsobem, jak najít rezolventní rezonance, je metoda vnějšího komplexního škálování, známá díky Augilarovi, Baslevovi a Combesovi [6, 7] již od 70. let minulého století. Hlavní myšlenkou je přeškálovat vnější hrany grafu transformací

$$U_\theta g(x) = e^{\theta/2} g(e^\theta x) \tag{4}$$

a vnitřní hrany ponechat beze změny. Tato transformace je pro reálné θ unitární, zajímavé vlastnosti má ale pro θ s netriviální imaginární částí. Funkce e^{ikx} pro k se zápornou imaginární částí zjevně nejsou kvadraticky integrabilní. Po transformaci při dostatečně velké imaginární části θ se kvadraticky integrabilními stanou. Přeškálovaný hamiltonián $U_\theta H U_{-\theta}$, který je nesamosdružený operátor, má vlastní čísla na místech rezonancí původního hamiltoniánu. Rezolventní rezonance tedy můžeme najít jako vlastní čísla tohoto nesamosdruženého operátoru.

Druhou možností definice rezonancí jsou tzv. *rozptylové rezonance*. Jsou to póly matice rozptylu, kterou můžeme definovat jako matici zobrazující vektor amplitud vcházejících vln na vektor amplitud vycházejících vln. Její prvky divergují pro komplexní energie, které odpovídají rozptylovým rezonancím.

Lze dokázat, že obě rodiny rezonancí si odpovídají [8]. Přesněji řečeno, množina rezolventních rezonancí je rovna sjednocení množiny rozptylových rezonancí a množiny vlastních hodnot (vnořených do spojitého spektra) původního hamiltoniánu s vlastními funkcemi, které mají nosič pouze na vnitřní části grafu. Je logické, že tyto hodnoty nepatří do rodiny rozptylových rezonancí, protože jejich vlastní funkce jsou identicky nulové na polopřímkách, tato řešení tedy neodpovídají rozptylovým stavům. Matice rozptylu je tedy nemůže „uvidět".

Rezonance vycházející z racionálních poměrů hran

Uvažujme kvantový graf bez potenciálu s tzv. delta-podmínkami ve vrcholech. Jsou to takové vazebné podmínky, u kterých je vlnová funkce v každém vrcholu spojitá a pro součet derivací vycházejících z každého vrcholu ve směru jednotlivých hran platí

$$\sum_{j=1}^{N} f_j'(v) = \alpha f(v), \tag{5}$$

tj. jejich suma je rovna násobku funkční hodnoty. Nechť vnitřní část grafu obsahuje smyčku hran, jejichž délky jsou násobky hodnoty l_0. Protože vlastní funkce pro negativní druhou derivaci jsou kombinací sinu a kosinu, je pro tento případ vlastní funkcí hamiltoniánu funkce, jejíž komponenty na jednotlivých hranách jsou siny, které mají nuly ve vrcholech smyčky (viz obr. 1) a jsou triviálně nulové mimo smyčku. Proto jsou vlastními čísly hamiltoniánu $\pi n^2/{l_0}^2$.

V článku [9] jsme se zabývali rezonancemi, které vzniknou, když tento racionální poměr délek hran porušíme. Potom se totiž původní vlastní hodnota v rovině k odsune do spodní komplexní poloroviny. Lze dokázat, že celkové množství rezolventních rezonancí se započítáním násobnosti (rezolventními rezonancemi jsou jak vlastní hodnoty, tak „čisté" rezonance) se nezmění.

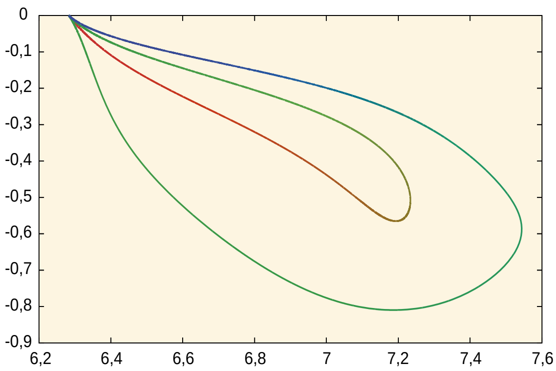
Ukažme si vše na příkladu grafu tvaru kříže s vnitřními hranami, jejichž délka závisí na parametru λ. Skládá se ze dvou vnitřních hran o délkách $l_1 = l\,(1 - \lambda)$ a $l_2 = l\,(1 + \lambda)$ a dvou polopřímek. Všechny čtyři hrany jsou spojeny v jednom bodě. Ve středním vrcholu uvažujeme delta-podmínku a v krajních vrcholech obou vnitřních hran tzv. Dirichletovu podmínku $f_1(l_1) = 0 = f_2(l_2)$. Chování rezonancí je zobrazeno na obr. 2 a 3. Barvou je znázorněna změna koeficientu λ, který se mění od červené $\lambda = 0$ po modrou $\lambda = 1$.

Rezonance se pro určité racionální hodnoty parametru λ vrací k reálné ose, protože pro tyto hodnoty opět existuje vlastní hodnota s vlastní funkcí s nosičem na obou vnitřních hranách grafu a nulou v jeho středním vrcholu.

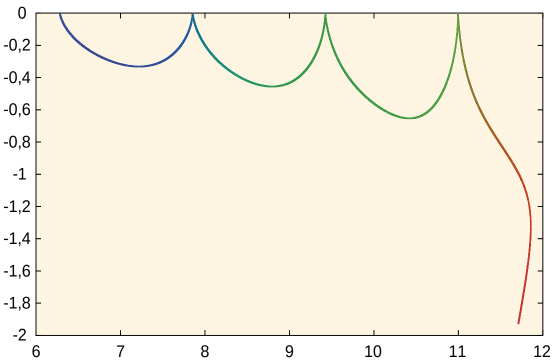
Na obr. 4 můžeme pozorovat křížení rezonancí. Dvě rezonance pro hodnotu $\lambda = 2{,}596$ se k sobě přiblíží a po chvíli se zase rozejdou. Pokud zvýšíme koeficient na hodnotu $\lambda = 2{,}598$, obě rezonance si „prohodí" druhou část trajektorie.

Asymptotika počtu rezonancí v kvantových grafech

Dalším problémem, který můžeme u rezonancí sledovat, je jejich počet. Kdybychom odpojili všechny polopřímky od vnitřní části grafu, byly by všechny rezolventní rezonance vlastními hodnotami. Asymptotické



Obr. 2 Trajektorie rezonance, která začíná v $k_0 = 2\pi$ pro $\alpha = 10$.



Obr. 3 Trajektorie rezonance pro $\alpha = 1$.

chování počtu vlastních hodnot pro Laplaceův-Beltramiho operátor na d-dimenzionální varietu je dáno Weylovým zákonem. Uvažujme tento operátor na d-dimenzionální kompaktní riemannovské varietě o ploše $|\Omega|$. Počet vlastních hodnot s absolutní hodnotou menší než λ je

$$N(\lambda) = \frac{\omega_d\,|\Omega|}{(2\pi)^d}\lambda^d \pm \frac{\omega_{d-1}\,|\partial\Omega|}{4(2\pi)^{d-1}}\lambda^{d-1} + o(\lambda^{d-1}), \quad (6)$$

kde $|\omega_d|$ značí objem d-dimenzionální koule o poloměru 1. Pro jednodimenzionální případ, kvantový graf o součtu délek vnitřních hran V, očekáváme tedy asymptotiku

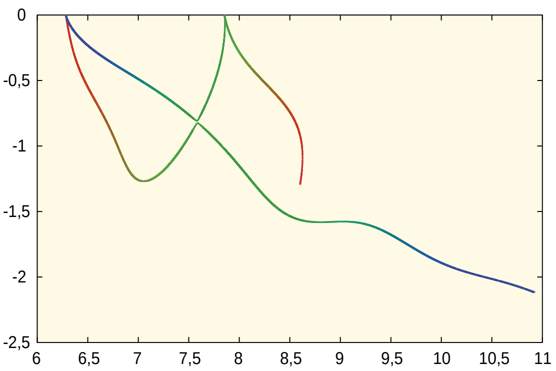
$$N(\lambda) = \frac{V}{\pi}\lambda + O(1).$$

Studujeme-li problém v k-rovině (tedy vynášíme-li odmocninu z energie), musíme předchozí výraz zdvojnásobit, protože každou vlastní hodnotu započteme dvakrát, neboť $k^2 = -k^2$.

Nyní budeme sledovat počet rezolventních rezonancí v kruhu o poloměru R v k-rovině. Očekávali bychom stejný výsledek jako v případě vlastních hodnot, tedy

$$N(R) = \frac{2V}{\pi}R + O(1).$$

Tato asymptotika platí u většiny grafů, pro některé z nich je však překvapivě konstanta v prvním členu asymptotiky menší. Takové grafy nazýváme *neweylovskými*. Příkladem může být graf, jehož jeden z vrcholů spojuje jednu vnitřní hranu s jednou polopřímkou a v tomto vrcholu je tzv. standardní (Kirchhoffova) vazebná podmínka. Tato podmínka je delta-podmínkou se silou $\alpha = 0$, což pro výše uvedený vrchol znamená, že jak funkční hodnota, tak derivace je v tomto bodě spojitá. Proto v tomto bodě není žádná interakce, takže



Obr. 4 Křížení rezonancí pro $\alpha = 2{,}596$.

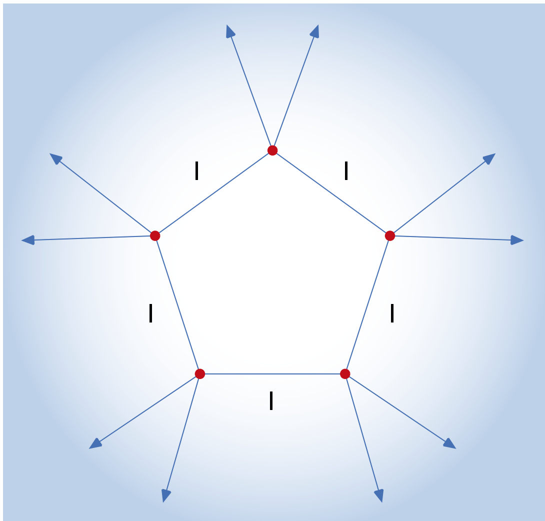
můžeme efektivně polopřímku s touto vnitřní hranou nahradit jednou velkou polopřímkou. Velikost vnitřní části grafu se tedy sníží a konstanta v prvním členu asymptotiky je menší.

Davies a Pushnitski [10] studovali asymptotiku rezonancí pro standardní (Kirchhoffovy) podmínky. Zjistili, že graf je neweylovský, právě když obsahuje „vyvážený" vrchol (vrchol spojující stejný počet vnitřních a vnějších hran).

V článku [11] jsme tento výsledek zobecnili na všechny vazebné podmínky. Graf je neweylovský, když efektivní vazebná matice $U_{\mathrm{ef}}(k)$ má vlastní hodnotu buď

$$\frac{1-k}{1+k}, \text{ nebo } \frac{1+k}{1-k}.$$

Dále jsme zjistili, že případ, který zvolili Davies s Pushnitskim, je výjimečný. Z celé podtřídy vazebných podmínek, které jsou permutačně symetrické, existují pouze dva případy, u nichž se mohou vyskytnout neweylovské grafy – standardní (Kirchhoffova) vazba a její protiklad „antiKirchhoffova" vazba. Pro



Obr. 5 Graf tvaru pravidelného mnohoúhelníku se dvěma připojenými polopřímkami v každém vrcholu.

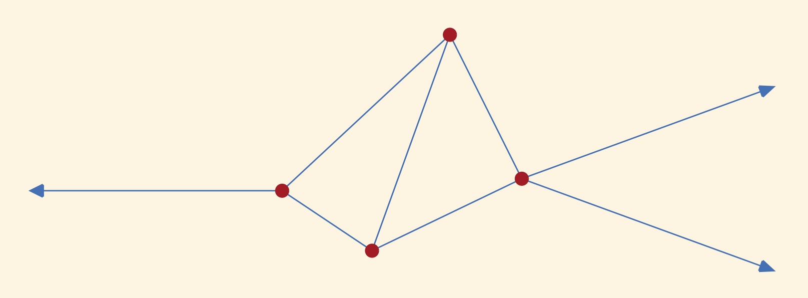
ostatní vazebné podmínky jsou všechny grafy weylovské.

Zatímco o tom, zda je graf weylovský, nebo neweylovský, rozhodují jeho lokální vlastnosti (efektivní vazebná matice ve vrcholu), pokud nás zajímá efektivní velikost grafu (tedy konstanta v prvním členu asymptotiky), musíme použít globální vlastnosti grafu. Ukazuje to následující příklad. Uvažujme graf typu pravidelného mnohoúhelníku se dvěma polopřímkami připojenými v každém bodě (obr. 5).

S využitím symetrie grafu lze vypočítat, že efektivní velikost je $W_n = nl/2$ pro $n \neq 0 \bmod 4$ a $W_n = (n-2)l/2$ pro n = 0 mod 4. Větší symetrie grafu pro počet vrcholů, který je násobkem čtyř, tedy způsobuje, že lze „vymazat" větší část vnitřku grafu. Efektivní velikost grafu tedy závisí na globální struktuře grafu, hlavně na jeho symetriích.

Dále jsme v článku [12] zkoumali, jak se asymptotika počtu rezonancí změní, vložíme-li graf do magnetického pole. Zjistili jsme, že magnetickým polem nelze změnit neweylovský graf na weylovský a obráceně. Ale je možné změnit efektivní velikost grafu, který je bez magnetického pole neweylovský.

» Vyvážený vrchol spojuje stejný počet vnitřních a vnějších hran. «



Obr. 6 Příklad neweylovského grafu se standardními podmínkami. Vrchol nejvíce vpravo je „vyvážený“.

Poděkování

Tento článek vznikl za podpory projektu Rozvoj působení postdoktorandů na Univerzitě Hradec Králové, reg. č. CZ.1.07/2.3.00/30.0015.

Literatura

[1] L. Pauling: „The diamagnetic anisotropy of aromatic molecules“, J. Chem. Phys. **4**, 673–677 (1936).

[2] K. Ruedenberg, C. Scherr: „Free-electron network model for conjugated systems, I. Theory“, J. Chem. Phys. **21**, 1565–1581 (1953).

[3] O. Hul, S. Bauch, P. Pakoński, N. Savytskyy, K. Zyczkowski, L. Sirko: „Experimental simulation of quantum graphs by microwave networks“, Phys Rev E **69**, 056205 (2005).

[4] M. Harmer: „Hermitian symplectic geometry and extension theory“, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 9193–9203 (2000).

[5] V. Kostrykin, R. Schrader: „Kirchhoff’s rule for quantum wires. II: The inverse problem with possible applications to quantum computers“, Fortschritte der Physik **48**, 703–716 (2000).

[6] J. Aguilar, J.-M. Combes: „A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger operators“, Commun. Math. Phys. **22**, 269–279 (1971).

[7] E. Baslev, J.-M. Combes: „Spectral properties of many body Schrödinger operators with dilation analytic interactions“, Commun. Math. Phys. **22**, 280–294 (1971).

[8] P. Exner, J. Lipovský: „Equivalence of resolvent and scattering resonances on quantum graphs“, in: *Adventures in Mathematical Physics.* (Proceedings, Cergy-Pontoise 2006), AMS „Contemporary Mathematics“ Series, vol. 447, Providence, R.I., 2007; s. 73–81.

[9] P. Exner, J. Lipovský: „Resonances from perturbations of quantum graphs with rationally related edges“, J. Phys. A **43**, 105301 (2010).

[10] E. B. Davies, A. Pushnitski: „Non-Weyl resonance asymptotics for quantum graphs“, Analysis & PDE **4**, 729–756 (2011).

[11] E. B. Davies, P. Exner, J. Lipovský: „Non-Weyl asymptotics for quantum graphs with general coupling conditions“, J. Phys. A **43**, 474013 (2010).

[12] P. Exner, J. Lipovský: „Non-Weyl resonance asymptotics for quantum graphs in a magnetic field“, Phys. Lett. A **375**, 805–807 (2011).

Nukleární medicína
molekulární výzkum, diagnostika a terapie

časopis České společnosti nukleární medicíny České lékařské společnosti Jana Evangelisty Purkyně

- *Periodikum pro všechny odborníky, kteří v oboru pracují – lékaře, farmaceuty, chemiky, fyziky, přírodovědce, radiologické asistenty, všeobecné sestry, zdravotní a farmaceutické laboranty a další odborné pracovníky.*
- *Uveřejňujeme editorialy, původní a přehledové články, recenze knih a abstrakta originálních sdělení vybraných časopisů, zajímavé kazuistiky nebo obrazy, zprávy z kongresů a konferencí, informace z ČSNM i jednotlivých pracovišť, historické črty a další zajímavosti z oboru.*
- *Vychází 4x ročně – březen, červen, září, prosinec.*
- *Časopis je zařazen v databázi EBSCO a v Seznamu recenzovaných neimpaktovaných periodik vydávaných v ČR.*
- *Příspěvky jsou publikovány v češtině nebo slovenštině s abstrakty v angličtině.*
- *K cílům časopisu patří zpřístupnit odborné informace i méně jazykově vybaveným pracovníkům v oboru a umožnit mladým autorům získat publikační zkušenosti.*

Redakce:
Klinika nukleární medicíny,
3. LF UK, Ruská 87, 100 00 Praha 10
fax: 267162660
e-mail: nuklmed@gmail.com
Webové stránky:
www.prolekare.cz/nuklearni-medicina
Informace pro autory:
www.prolekare.cz/nuklearni-medicina-pokyny

Předplatné, jednotlivá čísla:
Nakladatelské a tiskové oddělení ČLS JEP,
Sokolská 31, 120 26 Praha 2
tel.: +420 296 181 805 – Jana Spalová,
e-mail: spalova@cls.cz
Předplatné: ČR/rok - 200,00 Kč,
SR/rok - 10,76 €
Jednotlivé číslo ČR - 50,00 Kč, SR - 2,69 €

PŘÍŠTĚ VYCHÁZÍ

Z obsahu:
❑ Nová metoda semikvantitativního hodnocení ^{123}I-MIBG u neuroblastomu – výpočet celkového retenčního skóre
❑ Metastatické postižení parafaryngeální lymfatické uzliny u papilárního karcinomu štítné žlázy
❑ Dynamická scintigrafie jícnu v diagnostice poruch ezofageální motility