

Резонансы в одно- и двухчастичных системах на 1D-решетке

Ветров Сергей Сергеевич

Филиал МГУ в г. Дубне

Научный руководитель: чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор Виктор Лазаревич Аксенов

Научный консультант: д.ф.-м.н. Мотовилов Александр Константинович

Дубна
2026

Решеточные модели возникают в различных разделах физики. Среди таких моделей — гамильтониан системы нескольких частиц на решетке, который можно рассматривать как минималистскую версию соответствующей модели Бозе- или Ферми-Хаббарда, включающую фиксированное конечное число частиц определенного типа. Кроме того, соответствующие дискретные N -частичные гамильтонианы можно считать естественными приближениями для их непрерывных аналогов. В последние десятилетия растет интерес к исследованию уравнения Шредингера в разностном подходе для решения задач, связанных с микроэлектроникой.

Цель:

Исследование связанных состояний и резонансов, порождаемых финитными возмущениями двустороннего оператора Якоби, и, в частности, изучение связанных состояний и резонансов, возникающих в системах одной и двух частиц на одномерной решетке.

Задачи:

- 1 изучить спектральные свойства невозмущенной двухсторонней матрицы Якоби с постоянными коэффициентами;
- 2 исследовать на наличие резонансов матрицу Якоби с финитными потенциалами;
- 3 применяя сформулированные теоремы, исследовать на наличие резонансов систему двух частиц на одномерной решетке с различными финитными потенциалами.

Методы:

Для решения поставленных задач использовались элементы спектральной теории, квантовой механики и теории функций комплексного переменного. Численные расчеты проводились с помощью программного пакета Wolfram Mathematica.

Связь непрерывной задачи с задачей на решетке

В случае одномерной частицы переход к решеточной модели можно провести путем аппроксимации производной второго порядка соответствующей конечно-разностной производной

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \approx \frac{\psi(x+\delta) + \psi(x-\delta) - 2\psi(x)}{\delta^2},$$

где δ – шаг решетки, $\delta > 0$. Тогда стационарное уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

при $x = j\delta$, $j \in \mathbb{Z}$, может быть приближенно записано как

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{j+1} + \psi_{j-1} - 2\psi_j}{\delta^2} + V_j\psi_j = E\psi_j, \quad (1)$$

где $\psi_j = \psi(j\delta)$. После введения обозначений $\tilde{V}_j = \frac{2m\delta^2}{\hbar} V_j$ и $\tilde{E} = \frac{2m\delta^2}{\hbar} E$, уравнение (1) принимает вид

$$-(\psi_{j+1} + \psi_{j-1} - 2\psi_j) + \tilde{V}_j\psi_j = \tilde{E}\psi_j, \quad j \in \mathbb{Z}.$$

Квазиотделение движения центра масс

Оператор кинетической энергии системы двух частиц, движение которых ограничивается одномерной бесконечной периодической решеткой $\mathbb{Z}$ имеет вид

$$\begin{aligned}(H_0 f)(x_1, x_2) = & -\frac{1}{2m_1} (f(x_1 + 1, x_2) - 2f(x_1, x_2) + f(x_1 - 1, x_2)) - \\ & -\frac{1}{2m_2} (f(x_1, x_2 + 1) - 2f(x_1, x_2) + f(x_1, x_2 - 1)),\end{aligned}\quad (2)$$

где $f \in \ell_2(\mathbb{Z} \times \mathbb{Z})$, $x_1, x_2 \in \mathbb{Z}$ – координаты первой и второй частиц, соответственно, а m_1, m_2 – их массы.

Выделяя в H_0 движение центра масс мы получим послойный гамильтониан

$$(H'_0(K)f)(x) = -[B(K)f(x+1) - Af(x) + B^*(K)f(x-1)],\quad (3)$$

представляющий собой оператор Якоби, с независимыми от $x \in \mathbb{Z}$ коэффициентами $A \in \mathbb{R}$, $B(K) \in \mathbb{C}$:

$$B(K) = \frac{m_1 e^{-i\frac{K}{2}} + m_2 e^{i\frac{K}{2}}}{2m_1 m_2}, \quad A = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}, \quad K \in \mathbb{T} = (-\pi, \pi].$$

Свойства двухсторонней матрицы Якоби

Под оператором Якоби мы понимаем оператор J , действующий на пространстве $\mathcal{H} = \ell_2(\mathbb{Z})$ по правилу

$$(Jf)(x) = -(Bf(x+1) - Af(x) + B^*f(x-1)), \quad f = \begin{pmatrix} \dots \\ f(x+1) \\ f(x) \\ f(x-1) \\ \dots \end{pmatrix} \in \ell_2, \quad x \in \mathbb{Z}, \quad (4)$$

где $A \in \mathbb{R}$, $0 \neq B \in \mathbb{C}$.

Лемма 1.

Оператор J унитарно эквивалентен оператору J'

$$(J'f)(x) = -(|B|f(x+1) - Af(x) + |B|f(x-1)).$$

Спектр оператора J чисто непрерывный и заполняет интервал между минимумом и максимумом функции $A - 2|B| \cos p$, $p \in \mathbb{T}$, откуда следует, что

$$\sigma(J) = \sigma(\hat{J}) = [A - 2|B|, A + 2|B|].$$

Функция Грина оператора $\hat{J}$ в квазиимпульсном представлении имеет вид

$$\hat{G}_J(p, p', z) = \frac{1}{A - 2|B| \cos(p + \theta) - z} \delta(p - p'), \quad z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(\hat{J}), \quad p, p' \in \mathbb{T}.$$

Теорема 2.

Пусть $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(J)$, тогда функция Грина оператора Якоби J , действующего на пространстве $\mathcal{H} = \ell_2(\mathbb{Z})$ по правилу

$$(Jf)(x) = -(Bf(x+1) - Af(x) + B^*f(x-1)), \quad f \in \ell_2(\mathbb{Z}),$$

задается выражением

$$G_J(x, x', z) = \left(\frac{B^*}{|B|} \right)^{x-x'} \frac{-1}{[(A-z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{(A-z) + [(A-z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}}}{2|B|} \right)^{|x-x'|} \quad (5)$$

Потенциал, отличный от нуля в одном узле

Пусть на пространстве $\mathcal{H} = \ell_2(\mathbb{Z})$ действует оператор

$$H = H_0 + V, \quad (6)$$

где $H_0 = J$ – оператор Якоби, а V действует на $\ell_2(\mathbb{Z})$ как

$$Vf(x) = \begin{cases} \gamma f(x), & x = N \\ 0, & x \neq N \end{cases} = \gamma \delta_{x,N} f(x), \quad \gamma \in \mathbb{R}. \quad (7)$$

Все особенности функции Грина оператора H , обусловленные возмущением V , содержатся в функции

$$m_0(z) = 1 + \gamma \langle G_0 b_1, b_1 \rangle.$$

Уравнение $m_0(z) = 0$ допускает явное решение. Его корни имеют вид

$$\Pi_0 \begin{cases} z = A - \sqrt{4|B|^2 + \gamma^2}, & \gamma < 0 \\ z = A + \sqrt{4|B|^2 + \gamma^2}, & \gamma > 0 \end{cases}, \quad \Pi_1 \begin{cases} z = A - \sqrt{4|B|^2 + \gamma^2}, & \gamma > 0 \\ z = A + \sqrt{4|B|^2 + \gamma^2}, & \gamma < 0 \end{cases},$$

где Π_0 , Π_1 – физический и нефизический листы римановой поверхности функции $m_0(z)$.

Потенциал, отличный от нуля на конечном числе точек

Передем к рассмотрению оператора H , действующего на $\ell_2(\mathbb{Z})$ как

$$H = H_0 + V,$$

где $H_0 = J$ – оператор Якоби (4) на $\ell_2(\mathbb{Z})$,

$$(Vf)(x) = \sum_{i=1}^N (\gamma_{-i} \delta_{x,-i} + \gamma_i \delta_{x,i}) f(x), \quad (8)$$

Представим $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(a)} \oplus \mathcal{H}^{(s)}$, где

$$\mathcal{H}^{(a)} = \ell_2^{(a)}(\mathbb{Z}) = \{f : f(-x) = -f(x)\} \quad \mathcal{H}^{(s)} = \ell_2^{(s)}(\mathbb{Z}) = \{f : f(-x) = f(x)\}. \quad (9)$$

Функцию $f(x)$ можно записать

$$f(x) = \frac{f(x) + f(-x)}{2} + \frac{f(x) - f(-x)}{2} = f_{(s)}(x) + f_{(a)}(x).$$

Теорема 3.

Пусть h_0 – оператор, действующий на пространстве $\mathcal{H} = \ell_2^{(a)}(\mathbb{Z}) \oplus \ell_2^{(s)}(\mathbb{Z})$ по правилу

$$(h_0 f(x)) = -(|B|f(x+1) - Af(x) + |B|f(x-1)).$$

И пусть возмущение v определяется равенством

$$(vf)(x) = \sum_{i=1}^N (\gamma_{-i}\delta_{x,-i} + \gamma_i\delta_{x,i}) f(x), \text{ где } \gamma_i = \gamma_{-i}, \forall i \in 1 \dots N.$$

Тогда за все те особенности функции Грина возмущенного оператора $h = h_0 + v$, которые вносит взаимодействие v , отвечают корни выражения

$$\tilde{\Delta}(z) = \tilde{\Delta}_-(z)\tilde{\Delta}_+(z), \text{ где} \quad (10)$$

$$\tilde{\Delta}_{\pm}(z) = \det \left(\delta_{i,j} + \gamma_{N-j+1} \left[G_0(|i-j|) \pm G_0(|2N+2-i-j|) \right] \right), \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (11)$$

Пусть действие оператора $U_\theta : \ell_2(\mathbb{Z}) \rightarrow \ell_2(\mathbb{Z})$ задается формулой

$$(U_\theta f)(x) = e^{-ix\theta} f(x), \quad \theta \in \mathbb{R}.$$

Утверждение 4.

Пусть $B \in \mathbb{C}$, $A \in \mathbb{R}$, $B = |B|e^{i\theta}$, и

$$(Jf)(x) := -(Bf(x+1) - Af(x) + B^*f(x-1)), \quad f \in \ell_2(\mathbb{Z}).$$

Тогда оператор J унитарно эквивалентен оператору Якоби с вещественными коэффициентами, а именно

$$U_\theta^{-1} J U_\theta = J',$$

где

$$(J'f)(x) = -(|B|f(x+1) - Af(x) + |B|f(x-1)).$$

Следовательно, все утверждения теоремы 3, доказанные для оператора J' и возмущения v в случае $\theta = 0$, остаются верными и для общего оператора J . В частности, факторизация детерминанта Фредгольма для J имеет тот же вид, что и в случае $B \in \mathbb{R}$.

Возмущение в двух узлах (N=1)

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}(z) = & 1 - \frac{2\gamma}{[(A-z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}}} + \frac{\gamma^2}{([(A-z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}})^2} - \\ & - \frac{\gamma^2}{([(A-z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}})^2} \left(\frac{(A-z) + [(A-z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}}}{2|B|} \right)^4. \end{aligned} \quad (12)$$

Лемма 5.

Каким бы ни был параметр $\gamma \in \mathbb{R} \setminus 0$ и $\gamma \neq |B|$, уравнение $\tilde{\Delta}(z) = 0$ имеет корень вида

$$z = A - |B|(\omega + \omega^{-1}), \quad \omega = -\frac{|B|}{\gamma}. \quad (13)$$

Причем, если $\omega < 1$, то корень принадлежит физическому листу римановой поверхности функции $\Delta(z)$. В случае $\omega > 1$, то корень принадлежит нефизическому листу римановой поверхности $\Delta(z)$.

Лемма 6.

Пусть $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(J)$ и

$$\Delta_+(z) = [(A - z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}} - \gamma \left(1 + \left(\frac{(A - z) + [(A - z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}}}{2|B|} \right)^2 \right).$$

Если $\gamma \neq 0$, то уравнение $\Delta_+(z) = 0$ всегда имеет корень $z \in \mathbb{R} \setminus \sigma(J)$, принадлежащий физическому листу римановой поверхности функции $\Delta_+(z)$.

Если

$$|\gamma| < \gamma_{\text{крит}} := |B| \frac{4\sqrt{2 + \sqrt{5}}}{(3 + \sqrt{5})^2} \approx 0,30028|B|,$$

то уравнение $\Delta_+(z) = 0$ имеет два корня на нефизическом листе, отвечающих виртуальным уровням.

Если $|\gamma| = \gamma_{\text{крит}}$, то $z = z_{\text{крит}} = A \mp |B|(\sqrt{2 + \sqrt{5}} + \sqrt{2 + \sqrt{5}}^{-1}) \approx A \mp 2,54404 |B|$ – виртуальный уровень второго порядка.

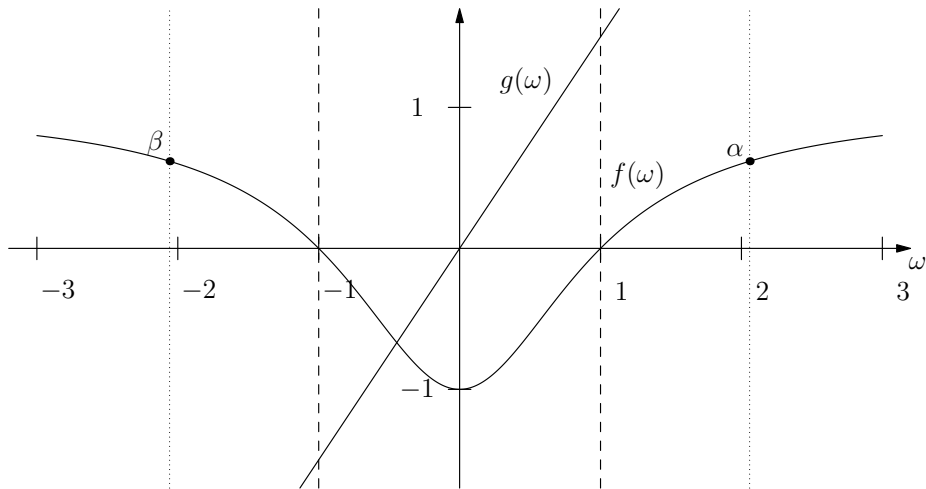


Рис. 1: Функции $f(\omega) = \frac{\omega^2 - 1}{\omega^2 + 1}$ и $g(\omega) = \frac{\gamma}{|B|}\omega$ в случае $|B| = 1$ и $\gamma = 1,5$. Точки α и β соответствуют $\pm\omega_{\text{крит}}$

Теорема 7.

Пусть $u \in (1, 2 + \sqrt{5})$. Примем, что $\gamma_{\pm}(u) := \pm |B| \frac{\sqrt{u^2 - 1}}{u(u - 1)}$,

$$\omega_{\pm}(u) = \frac{1}{2} \left(\pm \sqrt{u^2 - 1} \pm i \sqrt{4u - u^2 + 1} \right)$$

и

$$z_{\pm}(u) = A - |B|(\omega_{\mp}(u) + \omega_{\mp}^{-1}(u)).$$

При $\gamma = \gamma_{\pm}(u)$ комплексное число $z_{\pm}(u)$ и сопряженное к нему $z_{\pm}^*(u)$ являются корнями функции $\Delta_+(z)$, расположенными на нефизическом листе ее римановой поверхности и отвечающими резонансам.

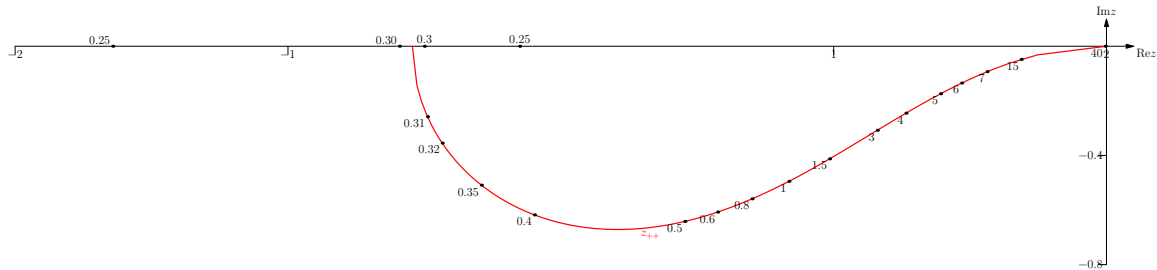


Рис. 2: Резонансы ($\text{Im}(z) \neq 0$) и виртуальные уровни ($\text{Im}(z) = 0$) – корни детерминанта Фредгольма $\Delta(z)$, определяемого из (10) при $|B| = 1$, $A = 2$ и $N = 1$, $\gamma > 0$. Рядом с точками, отмечающими положение резонансов и виртуальных уровней, указаны соответствующие им значения параметра γ

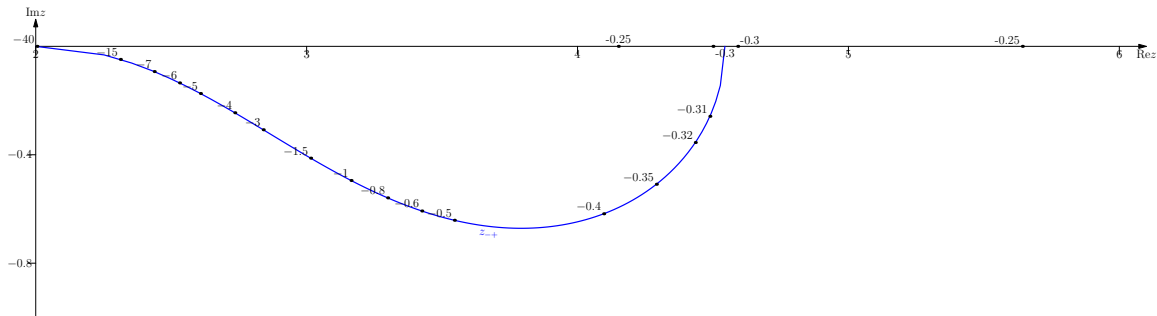


Рис. 3: Резонансы ($\text{Im}(z) \neq 0$) и виртуальные уровни ($\text{Im}(z) = 0$) – корни детерминанта Фредгольма $\Delta(z)$, определяемого из (10) при $|B| = 1$, $A = 2$ и $N = 1$, $\gamma < 0$. Рядом с точками, отмечающими положение резонансов и виртуальных уровней, указаны соответствующие им значения параметра γ

В случае $\gamma_1 = -\gamma_{-1} = \gamma$ и $N = 1$ функция $\Delta(z)$ принимает вид

$$\Delta(z) = 1 - \frac{\gamma^2}{([(A - z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}})^2} \left(1 - \left(\frac{(A - z) + [(A - z)^2 - 4|B|^2]^{\frac{1}{2}}}{2|B|} \right)^4 \right).$$

Лемма 8.

Уравнение $\Delta(z) = 0$ при $N = 1$ имеет четыре решения

$$z_{\pm} = A \pm |B|(\omega_+ + \omega_+^{-1}), \quad (14)$$

$$z'_{\pm} = A \pm i|B|(\omega_- - \omega_-^{-1}), \quad (15)$$

где

$$\omega_{\pm} = \sqrt{\frac{\mp(1 + \mu^2) + \sqrt{(1 + \mu^2)^2 + 4\mu^2}}{2\mu^2}}, \text{ где } \mu = \frac{\gamma}{|B|}.$$

При этом точки $z_{\pm}$ – корни $\Delta(z)$ на физическом листе (вне непрерывного спектра H), а $z'_{\pm}$ – корни $\Delta(z)$ на нефизическом листе.

Распространение результатов на случай эффективного гамильтониана двух частиц

При всяком значении квазиимпульса центра масс K послойный гамильтониан (3) представляет собой частный случай оператора Якоби J с коэффициентами $A \in \mathbb{R}$ и $B(K) \in \mathbb{C}$. Поэтому все результаты, полученные для произвольных операторов Якоби остаются справедливыми для гамильтониана H'_0 .

При этом коэффициенты A и $|B|$ выражаются в терминах масс частиц m_1 , m_2 и квазиимпульса движения центра масс K следующим образом

$$A = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}, \quad A_{m_1=m_2} = \frac{2}{m}$$
$$|B| = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} + \frac{2 \cos(K)}{m_1 m_2}}, \quad |B|_{m_1=m_2} = \frac{\cos(\frac{K}{2})}{m}$$

Заключение

- Исследованы спектральные свойства матриц Якоби с постоянными коэффициентами и их финитных возмущений;
- на этом основании установлены спектральные свойства послойных операторов Шредингера для системы двух частиц на $1D$ -решетке;
- проведена факторизация детерминанта Фредгольма $\Delta(z)$ для финитных потенциалов, удовлетворяющих условию $v(-i) = v(i)$, $i = 1, \dots, N$, в случае вещественных коэффициентов $B \in \mathbb{R}$;
- полученное представление обобщено на случай произвольного эрмитова оператора Якоби с комплексными коэффициентами $B \in \mathbb{C}$, не зависящими от номера строки;
- аналитически вычислены корни, отвечающие связанным состояниям и резонансам систем двух частиц с некоторыми финитными потенциалами.