



УДК 53.098

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЦЕПОЧЕК РЕЗОНАТОРОВ В ПРИСУТСТВИИ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

А.С. Мелихова<sup>a</sup><sup>a</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская ФедерацияАдрес для переписки: [alina.s.melikhova@gmail.com](mailto:alina.s.melikhova@gmail.com)

### Информация о статье

Поступила в редакцию 02.03.18, принята к печати 08.04.18

doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-3-535-542

Язык статьи – русский

**Ссылка для цитирования:** Мелихова А.С. Математическая модель цепочек резонаторов в присутствии внешнего магнитного поля // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2018. Т. 18. № 3. С. 535–542. doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-3-535-542

### Аннотация

**Предмет исследования.** Рассмотрена спектральная задача для цепочек слабо связанных шарообразных резонаторов при воздействии внешнего магнитного поля. Изучены две базовых геометрии цепочек, состоящих из идентичных резонаторов: цепочка с однократным изломом и цепочка с симметричным разветвлением. Вектор индукции магнитного поля направлен перпендикулярно плоскости, содержащей центры формирующих цепочку резонаторов. В точках сочленения резонаторов приложен дельтаобразный потенциал с одинаковой для всех таких точек интенсивностью. **Метод.** Математическая модель цепочки резонаторов, взаимодействующих друг с другом посредством одной точки, построена на основе теории самосопряженных расширений симметрических операторов. Сопряженное расширение в работе описано с помощью модификации формул Неймана. Части рассматриваемых систем обладают периодичностью, а сама модель построена таким образом, что метод трансфер-матриц, приспособленный для решения одномерных задач, может быть применен для получения спектра модельного гамильтониана. **Основные результаты.** Для обеих цепочек аналитически описана структура спектра: получены уравнения и неравенства, позволяющие найти зоны непрерывного спектра, а также значения энергий, относящиеся к дискретному спектру. Проведено численное моделирование, наглядно показывающее структуру непрерывного спектра рассматриваемых систем в зависимости от параметров модели. **Практическая значимость.** Так как модель имеет довольно большое количество варьируемых параметров, она может быть использована для построения реальных систем, обладающих определенными спектральными свойствами. Рассмотренные в работе геометрии являются базовыми элементами, на основе которых можно конструировать более сложные системы.

### Ключевые слова

магнитное поле, спектр, самосопряженность, трансфер-матрица, цепочка резонаторов

### Благодарности

Работа поддержана грантом 16-11-10330 Российского научного фонда.

## MATHEMATICAL MODEL OF RESONATOR CHAINS IN EXTERNAL MAGNETIC FIELD

A.S. Melikhova<sup>a</sup><sup>a</sup> ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian FederationCorresponding author: [alina.s.melikhova@gmail.com](mailto:alina.s.melikhova@gmail.com)

### Article info

Received 02.03.18, accepted 08.04.18

doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-3-535-542

Article in Russian

**For citation:** Melikhova A.S. Mathematical model of resonator chains in external magnetic field. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2018, vol. 18, no. 3, pp. 535–542 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2018-18-3-535-542

### Abstract

**Subject of Research.** The paper considers a spectral problem for chains of weakly coupled ball-shaped resonators under the action of an external magnetic field. Two basic geometries are studied composed of identical resonators: the chain with a single kink and the one with symmetric branching. The vector of magnetic field induction is assumed to be perpendicular to the plane including the centers of resonators that are forming the chain. The delta-like potentials with the same intensity are applied to all contact points. **Method.** The mathematical model of the chain consisting of identical resonators interacting with each other via a single point is constructed in the framework of the theory of self-adjoint extensions of symmetric operators.

The modification of Neumann formulas was used for adjoint operator description. Both systems have a periodicity in parts and the model itself is constructed in such way that it becomes possible to use the transfer matrix approach to obtain the spectrum of the model Hamiltonian. **Main Results.** The structure of the spectrum for both chains is analytically described; namely, all equations and inequalities are obtained, which give the possibility to find the bands of the continuous spectrum, as well as the energy values related to the discrete spectrum. Numerical simulation clearly demonstrates the structure of the continuous spectrum of the systems depending on the model parameters. **Practical Relevance.** Since the model has different variable parameters, it can be used to construct real systems that have certain spectral properties. The geometries considered in this paper are the basic elements for the construction of more complex systems.

**Keywords**

magnetic field, spectrum, self-adjointness, transfer matrix, chain of resonators

**Acknowledgements**

The work was partially financially supported by grant 16-11-10330 of Russian Science Foundation.

**Введение**

Создание адекватной математической модели, описывающей «поведение» частиц в довольно сложных составных системах, помогает качественно и количественно оценивать основные их характеристики. Целью данной работы является построение математической модели цепочек слабосвязанных шарообразных резонаторов при наличии внешнего магнитного поля и ее спектральный анализ. Такие системы, называемые обычно наностручками, уже активно изучаются, и вопрос описания спектра гамильтониана выходит на первый план [1, 2].

На данный момент уже существует множество работ, посвященных изучению спектральных свойств для графов различных геометрий и конфигураций ячейки (например, без поля [3–5] и с полем [6]), для цепочки дисков [7], а также для сферы с присоединенными проводами при наличии магнитного поля [8]. Во всех этих работах найдено решение спектральной задачи в зависимости от параметров рассматриваемых систем, но сами системы состоят из одномерных или же двумерных объектов. В [9–11] решается спектральная задача для шарообразных резонаторов, т.е. уже изучается трехмерный объект, но еще без внешних воздействий.

В настоящей работе рассматриваются изогнутая и разветвленная цепочки слабосвязанных шарообразных резонаторов, находящихся под воздействием внешнего магнитного поля. Модель строится на основе теории самосопряженных операторов [12, 13] с учетом модели точечных отверстий [14, 15], благодаря чему оказывается возможным использовать методы, приспособленные для одномерных задач, в частности, матрицу монодромии (трансфер-матрицу). В конечном итоге, мы имеем модель сложного трехмерного объекта, которая позволяет нам найти спектр системы в зависимости от ее исходных параметров, как физических, так и геометрических.

**Построение математической модели цепочек слабосвязанных резонаторов**

Опишем решение спектральной задачи  $\hat{H}\psi = E\psi$  для цепочек слабосвязанных резонаторов, где  $\hat{H}$  – оператор Шредингера с магнитным полем;  $\psi$  – волновая функция;  $E$  – энергия. Будем считать, что цепочка состоит из идентичных шарообразных резонаторов радиуса  $R$ , причем каждые соседние резонаторы ( $j-1$  и  $j$ ) имеют одну общую точку  $\mathbf{x}_j$ . Также предполагается, что на границе резонаторов выполнено условие Неймана, а во всех точках их сочленения приложен  $\delta$ -образный потенциал интенсивности  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Интуитивное математическое описание гамильтониана для систем с потенциалом, сосредоточенном на дискретном множестве точек, описано, например, в [16]. В данной работе для описания гамильтониана для цепочки резонаторов мы воспользуемся теорией самосопряженных расширений симметрических операторов.

Для лучшего понимания самой процедуры построения гамильтониана для цепочки взаимодействующих резонаторов подробно опишем ее для простейшего случая – цепочки, состоящей только из двух взаимодействующих резонаторов ( $\Omega_0$  и  $\Omega_1$ ). Исходный оператор (для каждой из еще невзаимодействующих ячеек цепи) представляет собой гамильтониан в присутствии внешнего магнитного поля, записанного в симметричной калибровке:

$$\hat{H}_j = (-i\hbar\nabla - e(\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2)^2 / (2m),$$

где  $i$  – мнимая единица;  $\hbar$  – постоянная Планка;  $\nabla$  – оператор набла;  $e$  – заряд частицы;  $\mathbf{B}$  – вектор индукции магнитного поля (будем считать, что оно однородно, направлено вдоль выделенной оси, например, вдоль оси аппликата, и имеет абсолютную величину  $B$ );  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор:  $\mathbf{r} = \{x, y, z\}$ ;  $m$  – масса частицы. Для удобства дальнейших вычислений перейдем к безразмерным величинам, введя следующие переменные:  $\tilde{x} = x/R$ ,  $\tilde{y} = y/R$ ,  $\tilde{z} = z/R$ ,  $\tilde{B} = eBR^2 / (2\hbar)$ ,  $\lambda = 2mER^2 / \hbar^2$ . Таким образом, опустив для краткости записи волну над новыми переменными, имеем:

$$\hat{H}_j = (i\nabla + \mathbf{B} \times \mathbf{r})^2, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 \oplus \hat{H}_1, \quad \text{dom}(\hat{H}) = \left\{ u : u \in W_2^2(\Omega_0) \oplus W_2^2(\Omega_1), \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega_j} = 0 \right\},$$

где  $\text{dom}(\hat{H})$  – это область определения оператора  $\hat{H}$ ;  $W_2^2$  – это пространство Соболева.

Для включения взаимодействия шаров сузим исходный оператор на множество функций, обращающихся в ноль в точке контакта (в данном случае – в точке  $\mathbf{x}_1$ ), замкнем, и уже получившийся симметрический оператор  $\hat{H}_j^0$  расширим таким образом, чтобы возник нетривиальный дефект, а части системы взаимодействовали. Для описания самосопряженного расширения рассматриваемого оператора выпишем его граничную форму (взяв функции  $u$  и  $v$  из его области определения), уже проинтегрировав по частям, в следующем виде:

$$\left( \hat{H}^0 u, v \right) - \left( u, \hat{H}^0 v \right) = \int_{\partial\Omega} (u \nabla \bar{v} - 2i(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) u \bar{v} - \bar{v} \nabla u) \mathbf{n} d\omega,$$

где чертой обозначается комплексное сопряжение,  $\mathbf{n}$  – вектор внешней нормали.

Теперь рассмотрим это выражение подробнее, выделив в области интегрирования место прокола, где не выполняются граничные условия ( $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_1 \setminus \Omega_\varepsilon$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$ ):

$$\left( \hat{H}^0 u, v \right) - \left( u, \hat{H}^0 v \right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 2\pi \left( \bar{a}_u^- b_u^- - \bar{a}_v^- b_v^- + \bar{a}_u^+ b_u^+ - \bar{a}_v^+ b_v^+ \right) - d \left( \bar{a}_u^+ \bar{a}_v^+ - \bar{a}_u^- \bar{a}_v^- \right),$$

где  $a$ ,  $b$  – константы, фигурирующие в представлении функции  $u$  (или  $v$ ) из области определения сопряженного оператора,  $u = a_u G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \lambda) + b_u + O(1)$  (причем плюсом и минусом отличаются коэффициенты, относящиеся к функции, определенной справа и слева от места соединения соответственно),  $G_B(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \lambda)$  – функция Грина для задачи с магнитным полем,  $O(1)$  – ограниченное слагаемое, не имеющее особенностей, а  $d$  – константа, возникающая при интегрировании слагаемого со смешанным произведением, вообще говоря, зависящая от  $\mathbf{B}$ .

Выберем коэффициенты таким образом, чтобы форма обнулялась, т.е. оператор был самосопряжен. Например, условие самосопряженности будет выполнено при следующей связи коэффициентов:

$$\begin{cases} \bar{a}_0^- = -a_1^+, \\ \bar{b}_0^- = b_1^+. \end{cases}$$

Рассматривать все возможные самосопряженные расширения в этой статье мы не будем, а аналогично [17] рассмотрим только наиболее естественное из них, указанное выше. В данной модели предполагается наличие  $\delta$ -образного потенциала в точках сочленения резонаторов. При наличии потенциала интенсивности  $\alpha \in \mathbb{R}$  условие самосопряженности оператора будет выполнено при следующем соотношении коэффициентов:

$$\begin{cases} \bar{a}_0^- = a_1^+, \\ \bar{b}_0^- - b_1^+ = \alpha a_0^-. \end{cases}$$

Далее можно обобщить полученные результаты на случай бесконечного числа резонаторов в цепи. В этом случае исходный оператор может быть представлен следующим образом:

$$\hat{H} = \bigoplus_{j=-\infty}^{\infty} \hat{H}_j, \quad \text{dom}(\hat{H}) = \left\{ u : u \in \bigoplus_{j=-\infty}^{\infty} W_2^2(\Omega_j), \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega_j} = 0 \right\},$$

а схема построения модели взаимодействующих шаров остается аналогичной. Модельный оператор будет самосопряжен при выполнении следующего условия:

$$\begin{cases} \bar{a}_{j-1}^- = a_j^+, \\ \bar{b}_{j-1}^- - b_j^+ = \alpha a_{j-1}^-; \end{cases} \tag{1}$$

$$b_j^+ = a_j^+ \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_j} (G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)) + a_j^- G_B(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_{j+1}, \lambda), \tag{2}$$

$$\bar{b}_{j-1}^- = a_{j-1}^+ G_B(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j, \lambda) + a_{j-1}^- \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_j} (G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)), \tag{3}$$

где  $\lambda_0$  – это регулярное значение рассматриваемого оператора. Волновая функция  $\psi_j$  в каждой элементарной ячейке бесконечной цепочки может быть представлена с помощью дефектных элементов:  $\psi_j(\mathbf{x}) = a_j^+ G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) + a_j^- G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{j+1}, \lambda)$ . А функция Грина для задачи с полем может быть найдена при

решении уравнения  $(\hat{H} - \lambda)f = h$  с некоторой заданной функцией  $h$  относительно неизвестной  $f$  в следующем виде (ср., например, с [8]):

$$G_B(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda) = G_0(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda) - \iiint G_0(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda) R_B(\xi; \mathbf{y}; \lambda) d^3\xi,$$

$$R_B(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} K_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda; B),$$

$$K_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda; B) = \int_{n-1} \dots \int K(\mathbf{x}, \xi_1; \lambda; B) K(\xi_1, \xi_2; \lambda; B) \dots K(\xi_{n-1}; \mathbf{y}; \lambda; B) d^3\xi_1 \dots d^3\xi_{n-1},$$

$$K(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda; B) = \left( \frac{B^2}{4} r^2 \sin^2 \theta + iB \cos(2\varphi) \right) G_0(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda),$$

где  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  – некоторые фиксированные точки в шаре (и на его поверхности),  $\{r, \theta, \varphi\}$  – сферические координаты точки  $\mathbf{x}$ , точки  $\xi$  и  $\xi_n$  при интегрировании пробегают по всем точкам шара,  $G_0(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \lambda)$  – функция Грина задачи без поля [10],  $R_B$  – резольвента интегрального уравнения Фредгольма II рода.

Ниже приведем решения спектральной задачи для конкретных геометрий цепочек взаимодействующих резонаторов.

### Решение спектральной задачи для цепочки с однократным изломом

В данном разделе рассмотрим задачу для бесконечной цепочки, допускающей однократный излом. А именно, будем считать, что возможен сдвиг относительно положения на одной оси только одной точки сочленения резонаторов. Для определенности пронумеруем все точки соединения  $\mathbf{x}$  натуральными номерами  $j$  от  $-\infty$  до  $+\infty$  и допустим сдвиг точки  $\mathbf{x}_0$  (рис. 1) на угол  $\gamma$  ( $\gamma \in [0; 2\pi/3)$ , причем  $\gamma = 0$  соответствует прямой цепочке, а при  $\gamma = 2\pi/3$  резонаторы под номерами 1 и  $-1$  уже начнут пересекаться друг с другом, что физически недопустимо). Также отметим, что вектор магнитной индукции в нашей модели направлен перпендикулярно плоскости, содержащей точки контактов резонаторов (т.е. в декартовой прямоугольной системе координат может быть представлен следующим образом:  $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ , где  $\mathbf{k}$  – единичный орт-вектор).

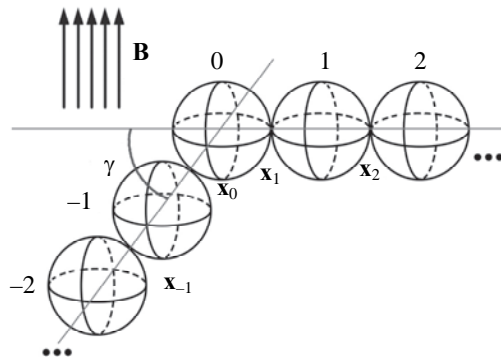


Рис. 1. Схема цепочки с однократным изломом

Для описания спектра структур, обладающих периодичностью, применимы различные подходы [18, 19]. Модель, представленная в данной работе, позволяет использовать метод трансфер-матриц. Спектральные свойства трансфер-матриц тесно связаны со спектральными свойствами самой системы [3]. А именно, ее собственные векторы образуют базис рассматриваемого пространства, и если  $(a_j^+ \ a_j^-)^T$  пропорционален собственному вектору с собственным числом по модулю, равному единице, то эти коэффициенты соответствуют значению энергии, принадлежащему непрерывному спектру, а если модуль собственного числа меньше единицы, то точечному спектру оператора. Для получения трансфер-матрицы  $\mathbf{M}_j$  перехода от резонатора  $j-1$  к резонатору  $j$  на прямом участке цепи ( $|j| \geq 1$ ) необходимо воспользоваться выражением (1), подставив в него явный вид коэффициентов  $b_{j-1}^+, b_j^-$  (2)–(3):

$$\begin{pmatrix} a_j^+ \\ a_j^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & \frac{-\alpha + 2 \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_j} (G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0))}{G_B(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_{j+1}, \lambda)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{j-1}^+ \\ a_{j-1}^- \end{pmatrix} = \mathbf{M}_j \begin{pmatrix} a_{j-1}^+ \\ a_{j-1}^- \end{pmatrix}.$$

При  $\gamma \neq 0$  необходимо также рассмотреть непосредственно «место излома». Можно сказать, что  $(a_1^+ \ a_1^-)^T = \mathbf{M}_1(a_0^+ \ a_0^-)^T = \mathbf{M}_1(\mathbf{M}_0(a_{-1}^+ \ a_{-1}^-)^T)$ . Получается, что в этом случае переход от одного прямого участка цепи к другому описывается следующей матрицей:

$$\begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{G_B(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j, \lambda)}{G_B(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)} & -\frac{L(\alpha, B, \lambda_0, \lambda)}{G_B(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)} \\ \frac{L(\alpha, B, \lambda_0, \lambda)}{G_B(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)} & \frac{L^2(\alpha, B, \lambda_0, \lambda) - G_B^2(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)}{G_B(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)G_B(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j, \lambda)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{-1}^+ \\ a_{-1}^- \end{pmatrix}, \quad j \neq 1,$$

где функция  $L(\alpha, B, \lambda_0, \lambda)$  используется для краткости записи формулы и задается следующим выражением:  $L(\alpha, B, \lambda_0, \lambda) = -\alpha + 2 \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_j} (G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda) - G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0))$ .

Найдем, при каком условии векторы  $(a_1^+ \ a_1^-)^T$  и  $(a_{-1}^+ \ a_{-1}^-)^T$  будут линейно зависимы, если последний с точностью до мультипликативной константы совпадает с собственным вектором трансфер-матрицы  $\mathbf{M}_j$ :

$$\frac{\mu^2 - \mu(L_B^2(\alpha, B, \lambda_0, \lambda) + G_B^2 - G_B^2(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)) + 1}{G_B(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)G_B} = 0,$$

где  $\mu$  – это собственное число трансфер-матрицы,  $G_B = G_B(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j, \lambda)$ ,  $j \neq 1$ . После ряда преобразований это выражение может быть упрощено:

$$\frac{|G_B^2(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)|^2 - G_B^2}{G_B(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda)G_B} = 0. \tag{4}$$

Очевидно, что  $G_B(\mathbf{x}_0(\gamma), \mathbf{x}_1, \lambda) = G_B$  при  $\gamma = 0$ , а значит, и уравнение (4) будет выполнено для любых  $\lambda$  из области допустимых значений. Таким образом, можно сформулировать следующее утверждение о структуре спектра модельного гамильтониана.

**Утверждение 1.** Пусть  $\gamma \in [0; 2\pi/3)$ . Непрерывный спектр имеет зонную структуру и состоит из всех  $\lambda$ , удовлетворяющих неравенству  $|L(\alpha, B, \lambda_0, \lambda)/G_B| \leq 2$ . При  $\gamma = 0$  дискретный спектр пуст. При  $\gamma \in (0; 2\pi/3)$  дискретный спектр состоит из всех  $\lambda$ , разрешающих уравнение (4) и удовлетворяющих неравенству  $|L(\alpha, B, \lambda_0, \lambda)/G_B| > 2$ .

### Решение спектральной задачи для разветвленной цепочки

В данном разделе приведем решение спектральной задачи для разветвленной цепочки, которая представляет собой три полубесконечные цепочки, присоединенные к одному общему резонатору (рис. 2). Будем считать, что все точки соединения шаров в этом случае лежат в одной плоскости, а вся система обладает ротационной симметрией вокруг оси, коллинеарной вектору  $\mathbf{B}$ , на угол  $2\pi/3$ . Также для удобства обозначений введем дополнительный индекс  $i$ , различающий цепочки ( $i = 1, 2, 3$ ). Таким образом, выражение (4) останется прежним с точностью до обозначений:  $a_j^\pm \rightarrow a_{i,j}^\pm$ ,  $b_j^\pm \rightarrow b_{i,j}^\pm$ .

Непрерывный спектр для разветвленной цепочки совпадает с непрерывным спектром изогнутой цепочки, описанным выше. Чтобы найти уравнение для дискретного спектра, необходимо рассмотреть систему, описывающую «связь» разных цепочек через общий резонатор:

$$\begin{cases} a_{1,1}^+ = -a_{1,0}^-, \\ (a_{1,1}^+ g + a_{1,1}^- G_B) - (a_{1,0}^- g + a_{2,0}^- G_{1,2} + a_{3,0}^- G_{1,3}) = -\alpha a_{1,0}^-; \\ a_{2,1}^+ = -a_{2,0}^-, \\ (a_{2,1}^+ g + a_{2,1}^- G_B) - (a_{1,0}^- G_{1,2} + a_{2,0}^- g + a_{3,0}^- G_{2,3}) = -\alpha a_{2,0}^-; \\ a_{3,1}^+ = -a_{3,0}^-, \\ (a_{3,1}^+ g + a_{3,1}^- G_B) - (a_{1,0}^- G_{1,3} + a_{2,0}^- G_{2,3} + a_{3,0}^- g) = -\alpha a_{3,0}^-; \end{cases}$$

где  $G_B = G_B(\mathbf{x}_{i,j-1}, \mathbf{x}_{i,j}, \lambda)$ ,  $j \in \mathbb{N}$ ,  $G_{1,2} = G_B(\mathbf{x}_{1,1}, \mathbf{x}_{2,1}, \lambda)$ ,  $G_{1,3} = G_B(\mathbf{x}_{1,1}, \mathbf{x}_{1,3}, \lambda)$ ,  $G_{2,3} = G_B(\mathbf{x}_{2,1}, \mathbf{x}_{3,1}, \lambda)$ ,  
 $g = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_{i,j}} (G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{i,j}, \lambda) - G_B(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{i,j}, \lambda_0))$ .

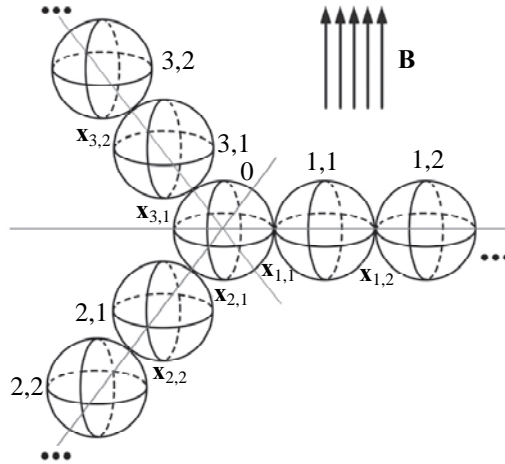


Рис. 2. Схема цепочки с симметричным Y-разветвлением

После ряда арифметических преобразований и предположений получаем, что эта система имеет решение, если:

$$(-\alpha + 2g - \mu G_B)^3 - (|G_{1,2}|^2 + |G_{1,3}|^2 + |G_{2,3}|^2)(-\alpha + 2g - \mu G_B) + G_{1,2}G_{1,3}G_{2,3} + |G_{1,2}||G_{1,3}||G_{2,3}| = 0. \quad (5)$$

Необходимо также учитывать, что к дискретному спектру можно будет отнести только те решения уравнения (5), которые удовлетворяют соответствующему условию на модуль собственного числа трансфер-матрицы. Таким образом, мы можем сформулировать следующее утверждение о спектре разветвленной цепочки.

**Утверждение 2.** Непрерывный спектр имеет зонную структуру и состоит из всех  $\lambda$ , удовлетворяющих неравенству  $|(-\alpha + 2g) / G_B(\mathbf{x}_{i,j}, \mathbf{x}_{i,j+1}, \lambda)| \leq 2$ . Дискретный спектр состоит из всех  $\lambda$ , разрешающих уравнение (5) и удовлетворяющих неравенству  $|(-\alpha + 2g) / G_B(\mathbf{x}_{i,j}, \mathbf{x}_{i,j+1}, \lambda)| > 2$ .

### Численное моделирование непрерывного спектра цепочек слабосвязанных шарообразных резонаторов

Как уже было сказано выше, непрерывный спектр для цепочек шарообразных резонаторов (обеих геометрий) может быть найден как решение следующего неравенства:

$$\left| \frac{-\alpha + 2g}{G_B} \right| \leq 2.$$

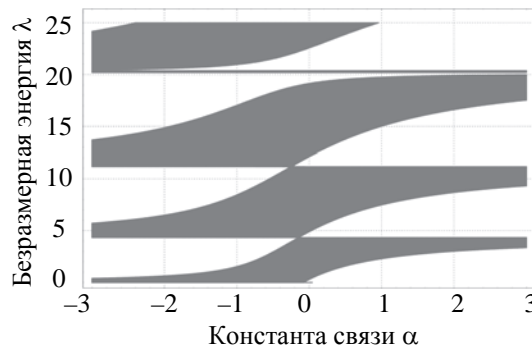


Рис. 3. Структура непрерывного спектра системы в зависимости от константы связи  $\alpha$  в отсутствии внешнего магнитного поля

Зоны непрерывного спектра не зависят от угла излома или разветвления (это видно из данного неравенства). Приведем результаты численного моделирования в зависимости от величины параметра соединения и от абсолютного значения вектора индукции магнитного поля. Значения функций Грина в точ-

ках сочленения резонаторов, участвующие в этом неравенстве, для различных  $B$  и  $\lambda$  были найдены численно с помощью метода конечных элементов. Из рис. 3 и рис. 4 видно, что наведение магнитного поля приводит к «сгущению» зон непрерывного спектра.

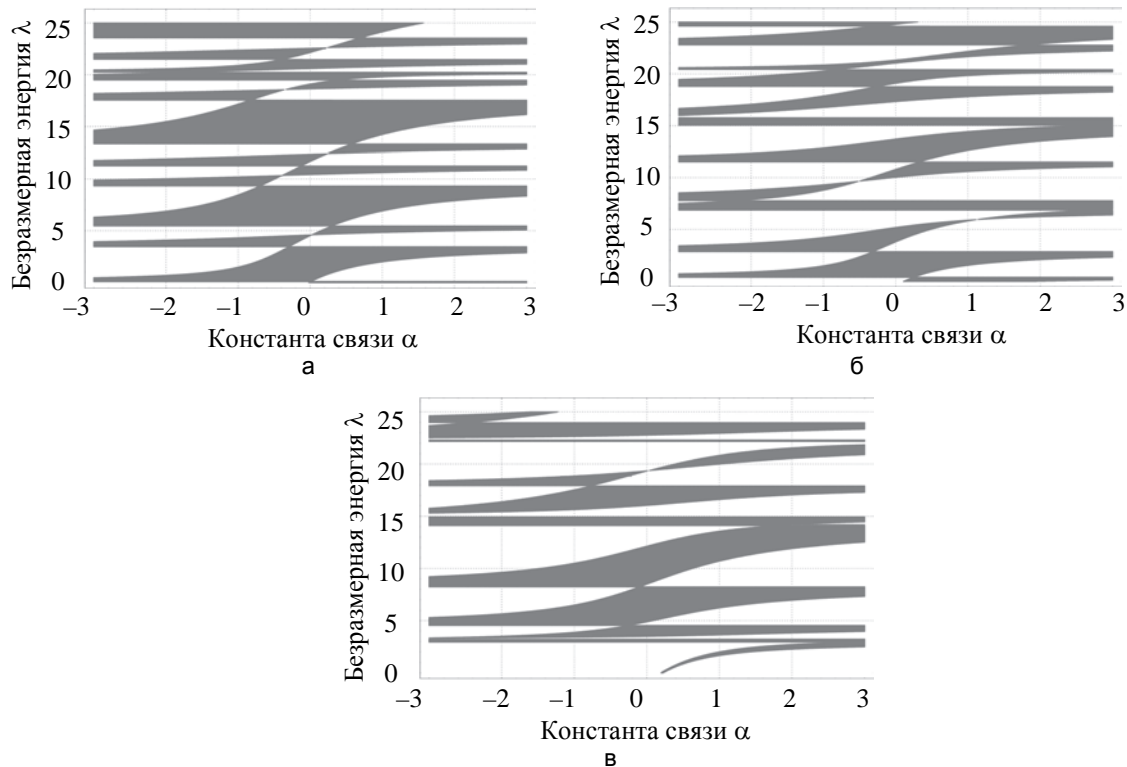


Рис. 4. Структура непрерывного спектра системы в зависимости от константы связи  $\alpha$  при ненулевом значении безразмерной абсолютной величины вектора индукции магнитного поля  $B$ :  $B = 1/2$  (а);  $B = 1$  (б);  $B = 3$  (в)

### Заключение

Построена модель цепочки слабосвязанных шарообразных резонаторов в присутствии внешнего магнитного поля. Описана структура спектра для базовых геометрий цепочек – цепочки с изломом и цепочки с симметричным разветвлением. Модель имеет множество варьируемых параметров, изменяя которые мы можем предсказать спектр соответствующей реальной системы, и наоборот, она позволяет найти конфигурацию системы с требуемыми спектральными характеристиками.

### Литература

1. Wang Y., Zhang H.J., Lu L., Stubbs L.P., Wong C.C., Lin J. Designed functional systems from peapod-like co@carbon to  $\text{Co}_3\text{O}_4$ @carbon nanocomposites // *ACS Nano*. 2010. V. 4. N 8. P. 4753–4761. doi: 10.1021/nn1004183
2. Yang Y., Li L., Li W. Plasmon absorption of Au-in- $\text{CoAl}_2\text{O}_4$  linear nanopeapod chains // *Journal of Physical Chemistry C*. 2013. V. 117. N 27. P. 14142–14148. doi: 10.1021/jp403150h
3. Duclos P., Exner P., Turek O. On the spectrum of a bent chain graph // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2008. V. 41. N 41. Art. 415206. doi: 10.1088/1751-8113/41/41/415206
4. Popov I.Yu., Smirnov P.S. Spectral problem for branching chain quantum graph // *Physics Letters A*. 2013. V. 377. N 6. P. 439–442. doi: 10.1016/j.physleta.2012.12.021
5. Popov I.Y., Skorynina A.N., Blinova I.V. On the existence of point spectrum for branching strips quantum graph // *Journal of Mathematical Physics*. 1992. V. 55. N 3. P. 3794–3801. doi: 10.1063/1.4867604
6. Exner P., Lipovsky J. Non-Weyl resonance asymptotics for quantum graphs in a magnetic field // *Physics Letters A*. 2011. V. 375. N 4. P. 805–807. doi: 10.1016/j.physleta.2010.12.042
7. Blinova I.V., Melikhova A.S., Popov I.Yu. Periodic chain of resonators: gap control and geometry of the system // *Journal of*

### References

1. Wang Y., Zhang H.J., Lu L., Stubbs L.P., Wong C.C., Lin J. Designed functional systems from peapod-like co@carbon to  $\text{Co}_3\text{O}_4$ @carbon nanocomposites. *ACS Nano*, 2010, vol. 4, no. 8, pp. 4753–4761. doi: 10.1021/nn1004183
2. Yang Y., Li L., Li W. Plasmon absorption of Au-in- $\text{CoAl}_2\text{O}_4$  linear nanopeapod chains. *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, vol. 117, no. 27, pp. 14142–14148. doi: 10.1021/jp403150h
3. Duclos P., Exner P., Turek O. On the spectrum of a bent chain graph. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2008, vol. 41, no. 41, art. 415206. doi: 10.1088/1751-8113/41/41/415206
4. Popov I.Yu., Smirnov P.S. Spectral problem for branching chain quantum graph. *Physics Letters A*, 2013, vol. 377, no. 6, pp. 439–442. doi: 10.1016/j.physleta.2012.12.021
5. Popov I.Y., Skorynina A.N., Blinova I.V. On the existence of point spectrum for branching strips quantum graph. *Journal of Mathematical Physics*, 1992, vol. 55, no. 3, pp. 3794–3801. doi: 10.1063/1.4867604
6. Exner P., Lipovsky J. Non-Weyl resonance asymptotics for quantum graphs in a magnetic field. *Physics Letters A*, 2011, vol. 375, no. 4, pp. 805–807. doi: 10.1016/j.physleta.2010.12.042

- Physics: Conference Series. 2016. V. 735. N 1. Art. 012062. doi: 10.1088/1742-6596/735/1/012062
8. Eremin D.A., Ivanov D., Popov I.Y. Model of tunneling through nanosphere in a magnetic field // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2012. V. 44. N 7-8. P. 1598–1601. doi: 10.1016/j.physe.2012.04.002
  9. Melikhova A.S., Popov I.Y. Bent and branched chains of nanoresonators // *Journal of Physics: Conference Series*. 2014. V. 541. N 1. Art. 012061. doi: 10.1088/1742-6596/541/1/012061
  10. Melikhova A.S., Popov I.Y. Spectral problem for solvable model of bent nano peapod // *Applicable Analysis*. 2017. V. 96. N 2. P. 215–224. doi: 10.1080/00036811.2015.1120289
  11. Melikhova A.S. Zigzag chain model and its spectrum // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2017. V. 8. N 2. P. 188–193. doi: 10.17586/2220-8054-2017-8-2-188-193
  12. Павлов Б.С. Теория расширений и явнорешаемые модели // УМН. 1987. Т. 42. № 6. С. 99–131.
  13. Popov I.Y., Kurasov P.A., Naboko S.N. et al. A distinguished mathematical physicist Boris S. Pavlov // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2016. V. 7. N 5. P. 782–788. doi: 10.17586/2220-8054-2016-7-5-782-788
  14. Popov I.Yu. The resonator with narrow slit and the model based on the operator extensions theory // *Journal of Mathematical Physics*. 1992. V. 33. N 11. P. 3794–3801.
  15. Popov I.Yu., Popova S.L. Zero-width slit model and resonances in mesoscopic systems // *Europhysics Letters*. 1993. V. 24. N 5. P. 373–377. doi: 10.1209/0295-5075/24/5/009
  16. Альберверо С.А. и др. Решаемые модели в квантовой механике. М., 1991. 568 с.
  17. Багмутов А.С., Попов И.Ю. Вольт-амперные характеристики для двух систем квантовых волноводов с присоединенными квантовыми резонаторами // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2016. Т. 16. № 4. С. 725–730. doi: 10.17586/2226-1494-2016-16-4-725-730
  18. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. 1. Москва: Мир, 1979. 458 с.
  19. Sanchez-Soto L.L., Monzon J.J., Barriuso A.J., Carinena J.F. The transfer matrix: a geometrical perspective // *Physics Reports*. 2012. V. 513. N 4. P. 191–227. doi: 10.1016/j.physrep.2011.10.002
  7. Blinova I.V., Melikhova A.S., Popov I.Yu. Periodic chain of resonators: gap control and geometry of the system. *Journal of Physics: Conference Series*, 2016, vol. 735, no. 1, art. 012062. doi: 10.1088/1742-6596/735/1/012062
  8. Eremin D.A., Ivanov D., Popov I.Y. Model of tunneling through nanosphere in a magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2012, vol. 44, no. 7–8, pp. 1598–1601. doi: 10.1016/j.physe.2012.04.002
  9. Melikhova A.S., Popov I.Y. Bent and branched chains of nanoresonators. *Journal of Physics: Conference Series*, 2014, vol. 541, no. 1, art. 012061. doi: 10.1088/1742-6596/541/1/012061
  10. Melikhova A.S., Popov I.Y. Spectral problem for solvable model of bent nano peapod. *Applicable Analysis*, 2017, vol. 96, no. 2, pp. 215–224. doi: 10.1080/00036811.2015.1120289
  11. Melikhova A.S. Zigzag chain model and its spectrum. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2017, vol. 8, no. 2, pp. 188–193. doi: 10.17586/2220-8054-2017-8-2-188-193
  12. Pavlov B.S. The theory of extensions and explicitly-solvable models. *Russian Mathematical Surveys*, 1987, vol. 42, no. 6, pp. 127–168. doi: 10.1070/RM1987v042n06ABEH001491
  13. Popov I.Y., Kurasov P.A., Naboko S.N. et al. A distinguished mathematical physicist Boris S. Pavlov. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2016, vol. 7, no. 5, pp. 782–788. doi: 10.17586/2220-8054-2016-7-5-782-788
  14. Popov I.Yu. The resonator with narrow slit and the model based on the operator extensions theory. *Journal of Mathematical Physics*, 1992, vol. 33, no. 11, pp. 3794–3801.
  15. Popov I.Yu., Popova S.L. Zero-width slit model and resonances in mesoscopic systems. *Europhysics Letters*, 1993, vol. 24, no. 5, pp. 373–377. doi: 10.1209/0295-5075/24/5/009
  16. Albeverio S., Gesteira F., Hoegh-Krohn R. et al. *Solvable Models in Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, 1988.
  17. Bagmutov A.S., Popov I.Yu. Current-voltage characteristics for two systems of quantum waveguides with connected quantum resonators. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2016, vol. 16, no. 4, pp. 725–730. doi: 10.17586/2226-1494-2016-16-4-725-730
  18. Ashcroft N., Mermin N. *Solid State Physics*, vol. 1. Moscow, Mir Publ., 1979, 458 p. (in Russian)
  19. Sanchez-Soto L.L., Monzon J.J., Barriuso A.J., Carinena J.F. The transfer matrix: A geometrical perspective. *Physics Reports*, 2012, vol. 513, no. 4, pp. 191–227. doi: 10.1016/j.physrep.2011.10.002

### Авторы

**Мелихова Алина Семеновна** – аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, Scopus ID: 56400883000, ORCID ID: 0000-0002-1274-6817, alina.s.melikhova@gmail.com

### Authors

**Alina S. Melikhova** – postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, Scopus ID: 56400883000, ORCID ID: 0000-0002-1274-6817, alina.s.melikhova@gmail.com