УДК 519.2

Одночастичное квантовое блуждание на Z^d

А.А. Замятин*, **В.А. Малышев***

* *Кафедра теории вероятностей,*
Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова,
Ленинские Горы 1, Москва, Россия, 119991

Аннотация. Мы даем полное описание спектра гамильтониана квантового блуждания с непрерывным временем одной частицы на $d-$мерной решетке. Внешнее поле определяется $\delta-$потенциалом.

Ключевые слова: квантовое блуждание, гамильтониан, точечный спектр, непрерывный спектр.

1. Введение

Мы рассматриваем квантовое блуждание с непрерывным временем одной частицы на $d-$мерной решетке Z^d. Внешнее поле задается $\delta-$потенциалом.

Введем гильбертово (т.е. полное линейное (векторное) над комплексным полем с определенным для любых двух элементов в нем скалярным произведением) пространство $l_2(Z^d)$. Элементы этого пространства будем обозначать через $f = \{f_x, x \in Z^d\}$.

Пусть e_k $d-$ мерный вектор, у которого на $k-$ месте стоит 1, а все остальные координаты нулевые. Определим линейный ограниченный самосопряженный оператор $H = H_0 + H_1 : l_2(Z^d) \to l_2(Z^d)$, где

$$(H_0 f)_x = -\lambda \sum_{k=1}^{d} f_{x-e_k} - 2f_x + f_{x+e_k}, x \in Z^d, \lambda \in R,$$

$$(H_1 f)_x = \mu \delta_{x,0} f_x,\ \mu \in R$$

и $f = \{f_x, x \in Z^d\} \in l_2(Z^d)$. Для определенности будем считать, что $\lambda > 0$.

Квантовая динамика или квантовое блуждание задается дифференциальным уравнением Шредингера

$$i\frac{df(t)}{dt} = Hf(t),$$

решением которого является волновая функция

$$f(t) = e^{-itH}\psi \in l_2(Z^d),$$

где $f(t) = \{f_x(t), x \in Z^d\}$ и $f(0) = \psi \in l_2(Z^d)$ – начальное условие.

Отметим, что вследствие самосопряженности оператора H, при каждом t оператор e^{-itH} является унитарным.

Волновая функция определяет положение частицы в момент t. Именно, с вероятностью

$$p_x(t) = |f_x(t)|^2$$

частица в момент времени t находится в узле $x \in Z^d$, где $f_x(t)$ - $x-$координата волновой функции $f(t) = \{f_x(t), x \in Z^d\}$.

В случае, когда начальное условие представляет собой собственную функцию гамильтониана, то есть $H\psi = \nu\psi$, где ν - собственное значение, решение выглядит следующим образом:

$$f(t) = e^{-itH}\psi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k t^k H^k \psi}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k t^k \nu^k \psi}{k!} = e^{-it\nu}\psi.$$

Отсюда следует, что $|f_x(t)|^2 = |f_x(0)|^2 = |\psi_x|^2$, где $\psi = \{\psi_x, x \in Z^d\}$ и поэтому вероятности $p_x(t)$ не зависят от времени

$$p_x(t) = |f_x(t)|^2 \equiv |\psi_x|^2,$$

что подчеркивает важность изучения точечного спектра гамильтониана.

Мы будем исследовать спектр гамильтониана H. Отметим, что похожая задача рассматривалась в статьях [1], [2]. Наш результат является обобщением результатов, полученных в этих статьях. В [2] рассмотрен только случай $\lambda = 1$ и $\mu < 0$. В [1] не объясняется, что в размерности $d \geq 5$ могут возникать собственные значения на границе непрерывного спектра.

Одночастичный гамильтониан изучался также в работах [3, 4], где рассматривался более общий потенциал внешнего поля, но размерность решетки $d \leq 3$.

2. Основной результат

Положим

$$\gamma(\varphi) = \cos\varphi_1 + ... + \cos\varphi_d,$$

где вектор $\varphi = (\varphi_1, ..., \varphi_d) \in T^d = (-\pi, \pi] \times \cdots \times (-\pi, \pi]$.

Обозначим через $c(d)$ классический интеграл Ватсона [5]:

$$c(d) = \pi^{-d} \int_0^{\pi} \ldots \int_0^{\pi} \frac{d\varphi_1 \ldots d\varphi_d}{d - \gamma(\varphi)}.$$

Отметим, что при $d = 1,2$ $c(d) = +\infty$, а при $d \geq 3$ $c(d) < \infty$. В статье [5] при $d = 3$ интеграл $c(3)$ был вычислен в явном виде. При $d \to \infty$ известно разложение в асимптотический ряд [6]

$$c(d) \sim \frac{1}{d} + \frac{1}{2d^2} + \frac{3}{4d^3} + \dots$$

Обозначим через $\sigma_{cont}(H)$, $\sigma_{pp}(H)$ – непрерывный и точечный спектры H [7].

Теорема 1 *Пусть* $\lambda > 0$.

— *Для всех* μ *и для любой размерности* d $\sigma_{cont}(H) = [0, 4\lambda d]$;
— *Для* $\mu = 0$ $\sigma_{pp}(H) = \emptyset$;
— *Для* $d = 1,2$ *точечный спектр* $\sigma_{pp}(H)$ *состоит из одного собственного значения* $\nu = \nu(\mu,\lambda)$, *где* $\nu \notin \sigma_{cont}(H)$;
— *Для* $d = 3,4$

если $|\frac{2\lambda}{\mu}| < c(d)$, *то точечный спектр* $\sigma_{pp}(H)$ *состоит из одного собственного значения* $\nu = \nu(\mu,\lambda)$, *где* $\nu \notin \sigma_{cont}(H)$; *если* $|\frac{2\lambda}{\mu}| \geq c(d)$, *то* $\sigma_{pp}(H) = \emptyset$.

— *Для* $d \geq 5$

если $|\frac{2\lambda}{\mu}| < c(d)$, *то точечный спектр* $\sigma_{pp}(H)$ *состоит из одного собственного значения* $\nu = \nu(\mu,\lambda)$, *где* $\nu \notin \sigma_{cont}(H)$; *если* $\frac{2\lambda}{\mu} = c(d)$, *то точечный спектр* $\sigma_{pp}(H)$ *состоит из одного собственного значения* $\nu = 4\lambda d$, *где* $\nu \in \sigma_{cont}(H)$; *если* $-\frac{2\lambda}{\mu} = c(d)$, *то точечный спектр* $\sigma_{pp}(H)$ *состоит из одного собственного значения* $\nu = 0$, *где* $\nu \in \sigma_{cont}(H)$; *если* $|\frac{2\lambda}{\mu}| > c(d)$, *то* $\sigma_{pp}(H) = \emptyset$.

— *Во всех случаях, если* $\mu > 0$, *то собственное значение* $\nu \geq 4\lambda d$; *если* $\mu < 0$, *то собственное значение* $\nu \leq 0$; *равенство в этих неравенствах достигается только в том случае, когда* $d \geq 5$ *и* $|\frac{2\lambda}{\mu}| = c(d)$.

Таким образом, из теоремы следует

— собственное значение (при условии, что существует) всегда единственно;
— при $d \geq 5$ возможна ситуация, когда собственное значение попадает на границу непрерывного спектра;
— при $d < 5$ собственное значение (при условии, что существует) всегда лежит вне непрерывного спектра;

Литература

1. *Faria da Veiga P. A., O'Carroll M., Schor R.* Excitation spectrum and staggering transformations in lattice quantum models // Physical Review E. — 2002. — Vol. 66, no. 2. — Article ID 027108.
2. *Hiroshima F., Sasaki I., Shirai T., Suzuki A.* Note on the spectrum of discrete Schrodinger operators // ArXiv:1209.0522. — 2012.
3. *Лакаев С. Н., Бозоров И. Н.* Число связанных состояний одночастичного гамильтониана на трехмерной решетке // Теоретическая и математическая физика. — 2009. — Т. 158, вып. 3. — С. 425–443.
4. *Lakaev S., Ozdemir E.* The existence and location of eigenvalues of the one particle discrete Schrodinger operators // ArXiv: 1505.03645. — 2015.
5. *Watson G. N.* Three triple integrals // The Quarterly Journal of Mathematics. —1939. — Vol. 10, no 1. — P. 266–276.
6. *Joyce G. S., Zucker I. J.* Evaluation of the Watson integral and associated logarithmic integral for the d–dimensional hypercubic lattice // J. Phys. A: Math. Gen. — 2001 — Vol. 34. — P. 7349–7354.
7. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики 1. Функциональный анализ. — М.: Мир, 1977.

UDC 519.2

One-particle quantum walk on Z^d

V.A. Malyshev*, A.A. Zamyatin*

* *Department of Probability Theory,*
Moscow State University,
Leninskie Gory 1, Moscow, 119991, Russia

We consider one-particle continuous time quantum walk in $d-$dimensional lattice and give a complete description of the spectrum of the corresponding Hamiltonian. The external field is determined by the $\delta-$potential.

Keywords: quantum walk, Hamiltonian, point spectrum, continuous spectrum.