Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Лихачев, Г. А. Виноградов, Функция Грина в задаче о динамике заряда на одномерной решетке с примесным центром, *ТМФ*, 2018, том 196, номер 1, 88–98

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9459>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.198.64.247

26 апреля 2023 г., 16:02:01

© 2018 г.

В. Н. Лихачев*, Г. А. Виноградов*

ФУНКЦИЯ ГРИНА В ЗАДАЧЕ О ДИНАМИКЕ ЗАРЯДА НА ОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ С ПРИМЕСНЫМ ЦЕНТРОМ

В приближении “сильной связи” (модель Хюккеля) рассмотрена эволюция волновой функции заряда на полубесконечной одномерной решетке с дополнительной энергией U на единственном примесном узле. В случае непрерывного спектра (при $|U| < 1$), когда отсутствует локализованное состояние, функция Грина построена с помощью разложения по собственным функциям непрерывного спектра. Выражение для временной функции Грина получено в виде степенного ряда по U . Неожиданно оказалось, что этот ряд сходится абсолютно даже в том случае, когда к непрерывному спектру добавляется локализованное состояние. Таким образом, можно сказать, что функция Грина, построенная по состояниям непрерывного спектра, имплицитно содержит и вклад локализованного состояния.

Ключевые слова: функция Грина, квантовая динамика.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9459>

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффективным методом при изучении транспортных свойств неметаллических систем является так называемое приближение сильной связи (tight-binding approximation, tb-приближение) или, по-другому, приближение Хюккеля [1]–[3]. В этом приближении волновая функция представляется в виде линейной комбинации локализованных состояний. В частном случае молекулярных систем – в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Тб-метод фактически является дискретной версией уравнения Шредингера. Используя этот подход, можно построить функцию Грина для исследуемой системы. Эта функция Грина, в свою очередь, позволяет вычислить транспортные свойства исследуемой системы.

Если система бесконечна и однородна, то спектр собственных значений непрерывен и функцию Грина можно построить путем разложения по собственным функциям тб-гамильтониана (см., например, работы [4]–[6]). Если система содержит дефекты, то подобно андерсоновской локализации возникают локализованные собствен-

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, Москва, Россия.
E-mail: gvin@deom.chph.ras.ru

Рис. 1. Одномерная полубесконечная решетка с примесным центром на первом узле с дополнительной энергией U . Числа сверху представляют нумерацию атомов ($m \in [1, \infty]$). Значения снизу суть энергии на узлах. Полукруглые стрелки – интегралы перескока между соседними узлами и их энергии.

ные функции, и от непрерывного спектра отщепляются энергетические уровни, соответствующие этим локализованным функциям. В этом случае задача нахождения функции Грина становится существенно сложнее.

В настоящей работе рассмотрена задача о распространении квантового возбуждения (заряда) на одномерной решетке с единственным примесным центром в приближении сильно взаимодействующих электронов. Эта задача точно решена с помощью временной функции Грина. Получено решение, в котором выражение для функции Грина для бездефектной решетки удалось аналитически продолжить на решение для решетки с дефектом, когда от спектра отщепляется локализованный уровень. Ранее подобная задача с тем же tb -гамильтонианом была решена другим способом [7]–[9].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Основная цель настоящей работы – получить решение для задачи об эволюции волновой функции на одномерной полубесконечной решетке с примесным центром при разных значениях степени дефектности примесного узла.

Рассмотрение проводится в рамках tb -приближения. В этой постановке задача имеет два параметра: интеграл перескока и энергия волновой функции на узле. Выберем значение интеграла перескока равным -1 , что одновременно означает выбор масштаба энергии. Энергию связи волновой функции с узлами решетки выберем равной $+2$. Такое значение энергии означает, что дно валентной зоны соответствует нулевому значению энергии электрона. В решетке есть единственный примесный узел с дополнительной энергией U . Решетка полубесконечна и схематически показана на рис. 1.

Гамильтониан рассматриваемой задачи в матричном представлении имеет трехдиагональный вид

$$H = \begin{pmatrix} 2-U & -1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \ddots \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где на главной диагонали стоят значения энергий (они выделены жирным шрифтом), а на двух побочных диагоналях – интегралы перескока. Решается безразмерное ($\hbar = 1$) нестационарное уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(m; t)$ $i \partial_t \Psi = H \Psi$ при условии, что сначала электрон локализован на узле $m = m_0$, т. е. $\Psi(m; t = 0) = \delta_{m, m_0}$.

Если $|U| < 1$, то спектр непрерывен, заключен в интервале энергий $[0, 4]$, и отщепления уровней от спектра не происходит. В этом случае решение в виде функции Грина ищется стандартным образом путем разложения по собственным функциям гамильтониана (1). Собственные функции и энергии задачи (1) имеют вид (см. приложение А)

$$\phi_k(m) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1 - 2U \cos k + U^2}} \{ \sin km - U \sin[k(m-1)] \}, \quad (2)$$

$$E(k) = 2[1 - \cos k], \quad E(k) \in [0, 4], \quad 0 < k < \pi.$$

Когда $|U| > 1$, то появляется локализованное состояние $\phi_{\text{loc}}(m)$ с энергией E_{loc} (см. приложение А)

$$\phi_{\text{loc}}(m) = \frac{\sqrt{U^2 - 1}}{U^m}, \quad E_{\text{loc}} = 2 - U - \frac{1}{U}, \quad (3)$$

а энергия E_{loc} отщепляется от непрерывного спектра: $E_{\text{loc}} < 0$ или $E_{\text{loc}} > 4$ в зависимости от знака U .

В соответствии с известной формулой разложения решения по собственным функциям гамильтониана для случая $U < 1$, когда отсутствует локализованное состояние, получаем представление функции Грина $G^0(m, m_0; t)$

$$G^0(m, m_0; t) = \int_0^\pi dk \phi_k(m) \phi_k(m_0) e^{-iE(k)t}. \quad (4)$$

Если же $|U| > 1$, то нужно учесть связанное состояние (3), и тогда функция Грина принимает вид

$$G^*(m, m_0; t) = \frac{(U^2 - 1)e^{-iE_{\text{loc}}t}}{U^{m+m_0}} + \int_0^\pi dk \phi_k(m) \phi_k(m_0) e^{-iE(k)t}, \quad (5)$$

где вклад локализованного состояния учитывается посредством дополнительного слагаемого. В общем случае функция Грина $G(m, m_0; t)$ фактически представляет собой значение волновой функции на узле m в момент времени t , если при $t = 0$ волновая функция была целиком локализована на узле m_0 , т. е. $\Psi(m; t = 0) = \delta_{m, m_0}$.

В случае отсутствия локализованного состояния ($|U| < 1$) можно получить представление функции $G^0(m, m_0; t)$ в виде степенного ряда по U . Для этого в выражении (4) для собственных функций необходимо использовать разложение $e^{2it \cos x} = J_0(2t) + 2 \sum_{m=1}^\infty i^m J_m(2t) \cos mx$ (см. работы¹⁾ [10]–[12]). Так как функция Грина (4)

¹⁾Соответствующая формула в книге [10] приведена с опечаткой: вместо J_0 стоит единица.

Рис. 2. Форма волнового пакета (модуль функции Грина для разных значений m) в момент времени $t = 10$. При $t = 0$ волновая функция локализована на узле $m_0 = 30$. Дополнительная энергия на примесном узле $U = 2$. Пока импульс не достиг начала цепочки, его форма остается такой же, как и в случае бесконечной цепочки. Сплошная линия представляет ряд (6), круги – результат вычисления интеграла (4). Разница между этими значениями имеет порядок $4 \cdot 10^{-13}$. Отличие от решения временного уравнения Шредингера имеет такую же точность. Скорость фронта импульса равна максимально возможной групповой скорости $v = 2$, и за время $t = 10$ фронт проходит расстояние ≈ 20 узлов решетки в обе стороны от $m_0 = 30$.

симметрична относительно перестановки $m \leftrightarrow m_0$, то достаточно привести выражение только для случая $m \geq m_0$:

$$G^0(m, m_0; t) = e^{-2it} i^{(m-m_0)} \times \\ \times \left\{ J_{m-m_0}(2t) - (-1)^{m_0} \left[iU J_{m+m_0-1}(2t) + (1-U^2) \sum_{j=0}^{\infty} (iU)^j J_{j+m+m_0}(2t) \right] \right\}. \quad (6)$$

На рис. 2 показана функция Грина в момент времени $t = 10$. На следующем рис. 3 для сравнения показана функция Грина в момент времени $t = 40$.

Удивительным образом оказывается, что ряд (6), полученный для случая $|U| < 1$, является точным также и для случая $|U| > 1$, т.е. совпадает с выражением (5).

Заметим, что непосредственное суммирование ряда (6) для больших t приводит к расходимости, связанной с конечной точностью вычислений. Здесь ситуация такая же, как с разложением в ряд функции e^{ix} : при $x \gg 1$ ряд расходится. В приложении Б приведено два способа вычисления ряда (6), годящихся и для больших времен.

Рис. 3. Форма волнового пакета в момент времени $t = 40$. При $t = 0$ волновая функция локализована на узле $m_0 = 30$. Параметр $U = 0.5$. Сплошная линия отображает ряд (6); круги – результат вычисления интеграла (4). Разница между этими значениями имеет порядок 10^{-11} . Отличие от решения временного уравнения Шредингера имеет такую же точность. За время $t = 40$ фронт импульса, распространяющийся направо и движущийся со скоростью $v = 2$, достигает узла $m = 110$. Фронт импульса, первоначально движущийся налево, за это же время отражается от левой границы решетки и, двигаясь направо, достигает узла $m = 50$.

Действительно, вычисление интеграла в (5) (случай $|U| > 1$) приводит к степенному ряду, но уже по обратным степеням U . Обозначив $V \equiv 1/U$, получаем выражение

$$\begin{aligned}
 G^*(m, m_0; t) = & \frac{U^2 - 1}{U^{m+m_0}} e^{-iE_{\text{loc}} t} + \\
 & + e^{-2it} [(i^{m-m_0})J_{m-m_0}(2t) + (i^{m+m_0-1})VJ_{m+m_0-1}(2t)] + \\
 & + e^{-2it}(V^2 - 1)V^{m+m_0-2} \left[\sum_{j=1}^{\infty} (iV)^j J_j(2t) + \sum_{j=0}^{m+m_0-2} (iU)^j J_j(2t) \right]. \quad (7)
 \end{aligned}$$

Как и ранее, в случае $|U| > 1$, непосредственное суммирование ряда в (7) приводит к расходимостям из-за конечной точности вычислений (см. приложение Б).

Полученный ряд (7) является просто другой формой записи ряда (6). Для доказательства совпадения выражений (6) и (7) для функций Грина вклад от локализованного состояния в выражении (7) нужно преобразовать с помощью производящей функции для функций Бесселя [10]: $e^{-iE_{\text{loc}} t} = e^{-2it} \sum_{j=-\infty}^{\infty} (iU)^j J_j(2t)$.

Рис. 4. Форма волнового пакета в момент времени $t = 30$. При $t = 0$ волновая функция локализована на узле $m_0 = 3$. Параметр $U = 2$. Сплошная линия отображает ряд (7); круги суть результат вычисления интеграла (5). Разница между этими значениями имеет порядок 10^{-10} . Отличие от решения временного уравнения Шредингера имеет такую же точность. Кроме уходящего направо импульса, есть еще часть волновой функции, оставшейся в локализованном состоянии. Форма импульса представляет собой суперпозицию импульса, исходно уходящего направо, и импульса, отраженного от начала решетки.

Так как полученный результат представляется довольно неожиданным, было численно проверено, что ряд (6) действительно правильно воспроизводит исходные выражения (4) и (5). Проверка осуществлялась как путем вычисления интегралов (4), (5), так и путем решения временного уравнения Шредингера, вытекающего из (1). На рис. 4 показана функция Грина в момент $t = 30$.

На рис. 5 показана зависимость от времени функции Грина на фиксированном узле $m = 5$.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение мы считаем возможным предположить, что полученный в рассмотренной задаче результат может носить более общий характер. А именно, пусть рассматривается “стандартная” квантовомеханическая задача с потенциалом, зависящим от параметра. И пусть у этого параметра есть пороговое значение, при котором появляется связанное состояние. Можно предположить, что функция Грина, полученная в допороговой области разложением только по собственным функциям

Рис. 5. Зависимость от времени функции Грина на узле $m = 5$. Параметры $U = 2$, $m_0 = 1$. При $t \rightarrow \infty$ модуль функции выходит на постоянное значение $\phi_{\text{loc}}(1)\phi_{\text{loc}}(5) = 0.18175$. Сплошная линия отображает формулу (7), светлые круги – результат вычисления интеграла в (5), черные круги – результат решения уравнения Шредингера. Разница между всеми этими значениями имеет порядок 10^{-12} .

непрерывного спектра, дает правильный ответ и в послепороговой области, где учитывается локализованное состояние. Другими словами, степенной ряд по параметру, представляющий собой функцию Грина, сходится всегда, т. е. не имеет каких-либо особенностей при критическом значении параметра, отвечающем появлению локализованного состояния.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Нахождение собственных функций гамильтониана (1)

Уравнение Шредингера на собственные значения гамильтониана (1) имеет вид

$$2\phi(m) - \phi(m-1) - \phi(m+1) = E\phi(m), \quad m = 2, 3, \dots \quad (\text{A.1})$$

Решение можно искать в виде $\phi(m) \sim a \sin km + b \cos km$. Подставляя это выражение в (A.1), получаем выражение для энергии

$$E(k) = 2(1 - \cos k). \quad (\text{A.2})$$

Для примесного узла $m = 1$ уравнение Шредингера имеет вид

$$(2 - U)\phi(1) - \phi(2) = E\phi(2). \quad (\text{A.3})$$

Можно убедиться, что уравнению (A.3) удовлетворяет следующая собственная функция:

$$\phi_k(m) = A(k) \{ \sin km - U \sin[k(m-1)] \}, \quad 0 < k < \pi. \quad (\text{A.4})$$

Нормировочный множитель $A(k)$ находится из условия ортогональности

$$\langle \phi_{k_1} | \phi_{k_2} \rangle = \delta(k_1 - k_2). \quad (\text{A.5})$$

Таким образом, нужно, чтобы было выполнено равенство

$$\begin{aligned} A(k_1)A(k_2) \sum_{m=1}^{\infty} \{ \sin k_1 m - U \sin[k_1(m-1)] \} \times \\ \times \sum_{m=1}^{\infty} \{ \sin k_2 m - U \sin[k_2(m-1)] \} = \delta(k_1 - k_2). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

После перемножения отдельных членов в формуле (A.6) возникает несколько комбинированных сумм. Вычислим их по отдельности. Первая сумма есть

$$S_1 \equiv \sum_{m=1}^{\infty} \sin k_1 m \sin k_2 m = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \{ \cos[(k_1 - k_2)m] - \cos[(k_1 + k_2)m] \}. \quad (\text{A.7})$$

Воспользовавшись известным соотношением $\sum_{m=1}^{\infty} \cos mx = \pi \delta(x) - 1/2$, получаем равенство $S_1 = \pi [\delta(k_1 - k_2) + \delta(k_1 + k_2)]/2$. Из-за того, что волновое число $k > 0$, в сумме S_1 остается только первое слагаемое:

$$S_1 = \frac{\pi}{2} \delta(k_1 - k_2). \quad (\text{A.8})$$

Для второй суммы аналогично получаем, что

$$S_2 \equiv \sum_{m=1}^{\infty} U^2 \{ \sin[k_1(m-1)] \sin[k_2(m-1)] \} = \frac{\pi U^2}{2} \delta(k_1 - k_2). \quad (\text{A.9})$$

Третью сумму $S_3 \equiv -U \sum_{m=1}^{\infty} \sin k_1 m \sin[k_2(m-1)]$ представим в виде

$$\begin{aligned} S_3 = \frac{U}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \cos k_2 \{ \cos[(k_1 + k_2)m] - \cos[(k_1 - k_2)m] \} + \\ + \frac{U}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \sin k_2 \{ \sin[(k_1 + k_2)m] + \sin[(k_1 - k_2)m] \}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Первая сумма в (A.10) равна $-\pi U \cos k_2 \delta(k_1 - k_2)/2$, слагаемое с $\delta(k_1 + k_2)$, как и ранее, опускаем. Вторая сумма вычисляется с помощью соотношения $\sum_{m=1}^{\infty} \sin mx = [\text{ctg}(x/2)]/2$. В результате получаем, что

$$S_3 = -\frac{\pi U}{2} \cos k_1 \delta(k_1 - k_2) + \frac{U}{4} \sin k_2 \left[\text{ctg} \frac{k_1 + k_2}{2} + \text{ctg} \frac{k_1 - k_2}{2} \right]. \quad (\text{A.11})$$

Выражение для суммы $S_4 \equiv -U \sum_{m=1}^{\infty} \sin k_2 m \sin[k_1(m-1)]$ получается из формулы (A.11) перестановкой $k_1 \leftrightarrow k_2$:

$$S_4 = -\frac{\pi U}{2} \cos k_2 \delta(k_2 - k_1) + \frac{U}{4} \sin k_1 \left[\text{ctg} \frac{k_2 + k_1}{2} + \text{ctg} \frac{k_2 - k_1}{2} \right]. \quad (\text{A.12})$$

При сложении $S_3 + S_4$ вторые слагаемые сокращаются, и мы приходим к равенству

$$S_3 + S_4 = -\frac{\pi U}{2}(\cos k_1 + \cos k_2)\delta(k_1 - k_2). \quad (\text{A.13})$$

Складывая $S_1 + S_2 + S_3 + S_4$, окончательно имеем

$$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = -\frac{\pi}{2}[1 + U^2 - U(\cos k_1 + \cos k_2)]\delta(k_1 - k_2). \quad (\text{A.14})$$

Подставляя это выражение в (A.6), для нормировочного множителя $A(k)$ получаем соотношение

$$A^2(k) = \frac{\pi}{2}[1 + U^2 - 2U \cos k]. \quad (\text{A.15})$$

Отсюда выражение для нормированной собственной функции имеет окончательный вид

$$\phi_k(m) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1 - 2U \cos k + U^2}} \{\sin km - U \sin[k(m-1)]\}. \quad (\text{A.16})$$

Отметим, что функция (A.16) (в случае $|U| < 1$) удовлетворяет условию полноты

$$\int_0^\pi \phi_k(m)\phi_k(n) dk = \delta_{m,n}. \quad (\text{A.17})$$

Заметим также, что уравнению на собственные значения (A.1) очевидным образом удовлетворяет экспоненциально убывающая функция $\phi_m \sim q^m$, где $|q| < 1$. Энергия этого состояния $E = 2 - q - 1/q$. При подстановке этого решения в уравнение (A.3) для первого узла, получаем, что $q = 1/U$. Нормируя это состояние на единицу, получаем следующее выражение для локализованного состояния:

$$\phi_{\text{loc}}(m) = \frac{\sqrt{U^2 - 1}}{U^m}, \quad E_{\text{loc}} = 2 - U - \frac{1}{U}. \quad (\text{A.18})$$

Задача по нахождению собственных значений и векторов в более сложной геометрии, но для случая отсутствия дефектов, была ранее уже рассмотрена [11].

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Некоторые подробности вычисления ряда (6)

Сделаем дополнительное замечание относительно сходимости ряда (6) и возможности его вычислить. Для исследования сходимости рассмотрим вспомогательный ряд, который входит в выражение (6) для функции Грина:

$$F(U, t) = \sum_{j=0}^{\infty} (iU)^j J_j(2t). \quad (\text{B.1})$$

Этот ряд сходится абсолютно при любых значениях U и t . Действительно, при больших значениях индекса j у функции Бесселя справедлива следующая аппроксимация (если опустить предэкспоненциальный множитель): $J_j(t) \simeq e^{j(\text{th}(\alpha) - \alpha)}$, где $\text{ch } \alpha = j/t$, $j \gg 1$ и $j > t$.

Если $j \gg t$, то

$$J_j \simeq \exp\left\{j\left[1 - \ln \frac{2j}{t} + O\left(\frac{t}{j}\right)\right]\right\}.$$

Рис. 6. Зависимость функции F от времени. Параметр $U = 2$. Сплошная линия отображает результат вычисления по формуле (Б.2); кругами изображен результат вычисления интеграла (Б.4). Максимальное расхождение имеет порядок 10^{-11} . Точками показан результат прямого суммирования в формуле (Б.1), которое приводит к расходимости для больших значений t .

Таким образом, функция Бесселя $J_j(t)$ убывает по индексу j быстрее, чем экспонента. Следовательно, ряд (Б.1) сходится абсолютно.

Следует сделать еще одно замечание относительно эффективности численного подсчета ряда (Б.1). Непосредственное суммирование в случае $|U| > 1$ может дать неправильный результат из-за конечной точности вычислений. Действительно, рассматриваемый ряд (Б.1) является знакопеременным (по вещественной и мнимой частям). При этом отдельные члены ряда (в случае $|U| > 1$ и $t \gg 1$) могут достигать больших (по модулю) значений.

Для этого ряда максимальное по j значение $F_j \equiv U^j J_j(2t)$ равно

$$F_j = \frac{1}{\sqrt{2\pi t(U - 1/U)}} e^{t(U - 1/U)}$$

(оно достигается при $j \sim t(U + 1/U)$). И если это значение имеет порядок обратной точности вычислений, то ответ становится неверным. Стандартная точность вычислений на языке **FORTRAN** имеет порядок 10^{-15} . Если выбрать $U = 2$, то при $t \gtrsim 25$ ответ становится неточным, что видно на рис. 6. Поэтому в случае $|U| > 1$ для вычисления суммы (Б.1) следует использовать хорошо сходящийся ряд по $1/U$.

Для этого нужно взять производящую функцию для функций Бесселя

$$\exp \left[it \left(U + \frac{1}{U} \right) \right] = F(U, t) + F(U^{-1}, t) + J_0(2t). \quad (\text{Б.2})$$

Собственно говоря, использование именно этого соотношения позволяет убедиться в тождественности формул (6) и (7). Заметим, что в работе [10] (см. также книгу [12]) для этой формулы ошибочно указано ограничение $2t < |U|$.

Для вычисления ряда (Б.1) для *любых* значений U можно использовать дифференциальное уравнение. Продифференцировав (Б.1) по времени и воспользовавшись соотношением $2 dJ_j/dt = J_{j-1} - J_{j+1}$, получаем равенство

$$\frac{dF}{dt} = i\omega F + iUJ_0(2t) + J_1(2t), \quad \omega \equiv U + \frac{1}{U}, \quad F(0) = 1. \quad (\text{Б.3})$$

Решение этого уравнения можно записать в следующем виде:

$$F = \frac{1}{2} e^{i\omega t} - J_0(2t) + \frac{i}{2} \left(U + \frac{1}{U} \right) e^{i\omega t} \int_0^t e^{-i\omega\tau} J_0(2\tau) d\tau. \quad (\text{Б.4})$$

Функция F , полученная по приведенным выше формулам, показана на рис. 6.

Список литературы

- [1] G. Cuniberti, G. Fagas, K. Richter, “Fingerprints of mesoscopic leads in the conductance of a molecular wire”, *Chem. Phys.*, **281**:2–3 (2002), 465–476.
- [2] T. N. Todorov, “Tight-binding simulation of current-carrying nanostructures”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**:11 (2002), 3049–3084.
- [3] R. Movassagh, G. Strang, Y. Tsuji, R. Hoffman, “The Green’s function for the Hückel (tight binding) model”, *J. Math. Phys.*, **58**:3 (2017), 033505, 20 pp.
- [4] K. D. Sattler (ed.), *Fundamentals of Picoscience*, CRC Press, Boca Raton, FL, 2014.
- [5] D. A. Ryndyk, R. Gutiérrez, B. Song, G. Cuniberti, “Green function techniques in the treatment of quantum transport at the molecular scale”, *Energy Transfer Dynamics in Biomaterial Systems*, Springer Series in Chemical Physics, **93**, eds. I. Burghardt, V. May, D. A. Micha, E. R. Bittner, Springer, Berlin, Heidelberg, 2009, 213–335.
- [6] Ю. А. Кругляк, *Нанoeлектроника “снизу – вверх”*, Изд-во Стрельбицкого, Киев, 2016.
- [7] В. Н. Лихачев, Т. Ю. Астахова, Г. А. Виноградов, “‘Электронный пинг-понг’ на одномерной решетке. Движение волнового пакета до первого отражения”, *ТМФ*, **175**:2 (2013), 279–299.
- [8] В. Н. Лихачев, Т. Ю. Астахова, Г. А. Виноградов, “‘Электронный пинг-понг’ на одномерной решетке. Многократные отражения волнового пакета и захват волновой функции акцептором”, *ТМФ*, **176**:2 (2013), 306–321.
- [9] V. N. Likhachev, O. I. Shevaleevskii, G. A. Vinogradov, “Quantum dynamics of charge transfer on the one-dimensional lattice: wave packet spreading and recurrence”, *Chinese Phys. B*, **25**:1 (2016), 018708.
- [10] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, М., 1962.
- [11] N. J. Balmforth, P. J. Morrison, “Normal modes and continuous spectra”, *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, **773**, no. 1, Waves in Astrophysics, 1995, 80–94.
- [12] Р. О. Кузьмин, *Бесселевы функции*, ОНТИ, М.–Л., 1935.