УДК 621.315

В.М. Бурдейний
В.Х. Касіяненко

ЕФЕКТИВНИЙ ОПЕРАТОР ГАМІЛЬТОНА ГВИНТОВОГО НАНОДРОТУ

Вінницький національний технічний університет

Анотація

Одержано в матричній формі ефективний оператор Гамільтона для носіїв, які виконують вільний рух у квантовому дроті. Нанодріт має гвинтову геометричну форму і моделюється кругом який переміщується перпендикулярно до дотичної до гвинтової лінії. Використання стандартного методу диференціальної геометрії дозволяє встановити вигляд ефективного гамільтоніану і його залежність від геометричних характеристик системи.

Ключові слова: квантовий дріт,гвинтова лінія, криволінійні координати, оператор Белтрамі-Лапласа, Гамільтоніан.

Abstract

Effective Hamilton's operator for electrons moving into helical quantum wire has been determined. Helical structure was simulated by displacemen of circle along the helicoidal line. By applying of well-known methods the effective Hamiltonian was found and its dependence on geometric parameters was established.

Keywords: quantum wire, helical line, curved line coordinates , operator of Beltrami-Laplace, curved fiber, first and second fundamental forms, Beltrami-Laplace operator, operator of Hamilton.

Наноструктури відзначаються дуже багатою морфологією. Як правило, вона диктується технологічними умовами синтезу, стабілізації, сепарування на фракції. Приклад із колоїдними наночастинками золота дуже красномовний і показує, що їх оптичні спектри фундаментально відрізняються від спектру масивного золота. Це є свідченням того, що наночастинка успадковує лише загальні ознаки материнської кристалічної структури і домінуючими стають морфологічні ознаки-розміри, геометрична форма. Згадані тут фактори проявляються тим виразніше, чим більшим є відношення площі зразка до його об'єму, яке демонструє тенденцію до зростання саме у випадку нанооб'єктів.

Оскільки переважна більшість фізико-хімічних властивостей і практичних застосувань наночастинок виявляються високо чутливими до енергетичного спектру носіїв заряду, то цілком очевидною є необхідність застосування квантово-механічного підходу, який через розв'язання рівняння Шредінгера дозволив би врахувати вплив згаданих морфологічних чинників на власні значення енергії носіїв. Загальний підхід при цьому ґрунтується на застосуванні числових методів. Що ж до одержання аналітичних результатів, то в силу по суті необмеженої різноманітності геометричних форм кожен конкретний випадок вимагає індивідуального розгляду, влежить вибір підходящої заміни змінних, з подальшим розв'язанням хвильового рівняння у викривленому просторі[1,2], який генерується потенціалом геометричного конфайнменту.

Одному із таких випадків, який стосується ефективного геометричного потенціалу асоційованого з гелікоїдальною квантовою ниткою, досліджується в даній роботі. Дослідження руху частинки в квантовому дроті, який має форму гвинтової лінії, уявляється досить важливим не тільки з пізнавальної точки зору, а і тому, що значна кількість об'єктів, які служать технологічними матрицями для вирощування наночастинок, наприклад капсиди деяких вірусів, мають саме таку геометричну форму. Направляюча лінія гвинтового нанодроту описується стандартними одно параметричними рівняннями

$$x = aCos\left(\frac{\omega s}{u}\right) \quad , \quad y = aSin\left(\frac{\omega s}{u}\right) \quad , \quad z = \frac{v}{u}s \tag{1}$$

тут $(\omega / u) = \Omega -$ модуль вектора Дарбу, а $s -$ довжина, взята вздовж направляючої. Сукупність рівнянь (1) дає можливість записати[3] у явному вигляді вектори дотичної $\vec{t}$, нормалі $\vec{n}$ і бінормалі $\vec{b}$, які утворюють рухомий тригранник і в подальшому знайти такі параметри як кручення τ і кривизна k.

Тут прийнято модель, в якій квантовий дріт формується переміщенням круга з радіусом r_0 вздовж направляючої, яка задана рівнянням (1) так, що центр круга перебуває на гвинтовій лінії, а його площина перпендикулярна до одиничного вектора $\vec{t}$. Виберемо в площині цього рухомого кругу одиничні вектори $\vec{N}$ і $\vec{B}$, визначивши їх співвідношеннями:

$$\vec{N}=\vec{n}Cos\theta(s)+\vec{b}Sin\theta(s) \quad , \quad \vec{B}=-\vec{n}Sin\theta(s)+\vec{b}Cos\theta(s) \tag{2}$$

де $\vartheta(s)=-\tau s-$ кут повороту жорсткого тригранника щодо гвинтової лінії. Введенням полярних координат у площині кругу, для радіус-вектора частинки записуємо:

$$\vec{X}(s,\varphi,r)=\vec{x}(s)-r[\vec{B}Sin\varphi+\vec{N}Cos\varphi] \tag{3}$$

Звернувшись до відповідних означень[3] знаходимо коваріантний і контраваріантні метричні тензори, що дозволяє записати у явній формі модифікований оператор Белтрамі-Лапласа.

В силу конкретних значень роботи виходу з нанодроту для хвильової функції приймаються краєві умови Діріхле, що дозволяє представити розв'язок рівняння Шредінгера розкладом у ряд Фур'є-Бесселя, а саме:

$$\Psi\equiv\Psi(s,\varphi,r)=\sum_{m,\mu}\Psi_{m\mu}(s)\cdot f_{m\mu}(\varphi,r) \tag{4}$$

де $f_{m\mu}(\varphi,r)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi}\left|J'_m(\kappa_{m\mu})\right|}e^{im\varphi}J_m\left(\kappa_{m\mu}\dfrac{r}{r_0}\right)$ і $\kappa_{m\mu}-$ нуль порядку μ функції Бесселя $J_m(x)$.

Підстановкою (4) в хвильове рівняння є подальшим проектуванням на базисну систему функцій для коефіцієнтів $\Psi_{m\mu}(s)$, які описують рух вздовж осі нанодроту, приходимо до матричного рівняння, якому відповідає ефективний оператор Гамільтона:

$$\hat{H}_{n\nu,m\mu}=-\frac{\hbar^2}{2M}\left\{e^{i(m-n)\theta(s)}\left[\Lambda_{n\nu,m\mu}\partial_s^2-k\tau\Gamma_{n\nu,m\mu}\partial_s+ikmC_{n\nu,m\mu}-kZ_{n\nu,m\mu}\right]-\left(\frac{\kappa_{n\nu}}{r_0}\right)^2\delta_{nm}\delta_{\nu\mu}\right\} \tag{5}$$

в якому матричні елементи визначені на вище ортонормованій системі функцій.

Одержаний результат дозволяє встановити залежність Гамільтоніану від геометричних факторів, таких як кручення і кривизна гвинтового квантового дроту. Характерні значення діаметра нанодроту складають величини близькі до $1-10$ нм, що в порівнянні з іншими характерними довжинами дозволяє перейти до адіабатичного наближення, в якому нехтується переходами між рівнями розмірного квантування. Ефективний Гамільтоніан при цьому суттєво спрощується і приймає наступний вигляд:

$$\hat{H}_{n\nu}=-\frac{\hbar^2}{2M}\left\{\left[\Lambda_{n\nu,n\nu}(\partial_s^2+2in\tau\partial_s-n^2\tau^2)-kZ_{n\nu,n\nu}\right]-\left(\frac{\kappa_{n\nu}}{r_0}\right)^2\right\} \tag{6}$$

Із співвідношення (6) випливає, що геометричні фактори модифікують ефективну масу носіїв. Крім цього періодичність вздовж направляючої приводить до зонного характеру енергетичного спектру. Ширини дозволених і заборонених зон встановлюється із формули (6) переходом до представлення квазі хвильового вектору.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1.Atanasov Victor, Rossel Dandoloff, “Curvature induced behavior on a helical nanotube”, arcXiv:0803.3390v1.[quant.phys], 24 Marth, 2008 pp.5.

2.Вакарчук І.О., Квантова механіка, К. Наукова думка, 2005, 886с.

3.Корн Е., Г.Корн Справочник по математике, М., Наука, 1973, 832 с.

Бурдейний Володимир Мефодійович - кандидат фізико-математичних наук,доцент, професор кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця. brdnvldmr@ukrnet.mail

Касіяненко Василь Харитонович - доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця.

Kasiyanenko Vasyl Kharytonovych - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of General Physics, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia.

Burdeinyy Volodymyr Mefodiyovych – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of General Physics, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia.