УДК 538.955+538.975

В.М.Бурдейний
В.Х.Касіяненко

МАГНІТНА СКЛАДОВА ГАМІЛЬТОНІАНУ ЕЛЕКТРОНІВ, УТРИМУВАНИХ ГВИНТОВОЮ ПОВЕРХНЕЮ

Вінницький національний технічний університет

Анотація
Одержана у явній формі магнітна компонента оператора Гамільтона для електронів, локалізованих на гелікоїдальній поверхні, яка одержана трансляцією з одночасним обертанням прямолінійного відрізка вздовж гвинтової лінії. Для виділення ефектів геометричної природи використано адіабатичне наближення, поєднане з процедурою переходу до нескінченно тонкого шару.
Ключові слова: гвинтова поверхня, метричний тензор, векторний потенціал, калібровочна інваріантність, оператор Белтрамі-Лапласа, розмірне квантування.

Abstract
Contribution of magnetic field given in terms of vector potential for an electron confined by helicoidal surface constructed by translation of some rectilinear segment along a helical line has been determined. Effects of geometrical nature were established by applying of adiabatic approximation accompanied with the thin-layer procedure.
Key words: helic surface, metric tensor, vector potential, guide invariance, Beltrami-Laplace operator, size quantification.

Сучасні технології синтезу наноматеріалів дозволяють створювати структури широкого спектру розмірів, геометричних форм та фізико-хімічного складу. Для цього використовуються не тільки традиційні для виготовлення масивних зразків процеси, наприклад молекулярної епітаксії, імплантаційні та літографічні техніки, але і технології, які базуються на біологічних об'єктах, наприклад вірусах, як шаблонах для формування наноструктур. В цьому контексті особливий інтерес викликають віруси тютюнової мозаїки, які, в силу своєї специфічної гвинтподібної будови, створюють технологічний каркас для створення наночастинок різноманітної, зокрема, гелікоїдальної геометричної форми.

В зв'язку із вищесказаним, стає цілком зрозумілою необхідність дослідження електронного спектру гелікоїдальних нанодротів, який є визначальним для тлумачення транспортних, оптичних електрофізичних та інших, чутливих до геометричних факторів, властивостей гвинтових наноструктур. Одним із способів дослідження енергетичного спектру був і залишаться бути ефективним метод вивчення реакції системи на дію зовнішнього магнітного поля. Ця дія в першу чергу позначається на операторі Гамільтона електронів. Магнітна частина гамільтоніану і є об'єктом дослідження цієї роботи.

Гвинтова поверхня виділяється з природного 3-мірного евклідового простору двомірною параметризацією шляхом певного граничного переходу. Цілком зрозуміло, що до даної точки поверхні з тримірного простору можна перейти нескінченною множиною траєкторій. Таким чином, має місце проблема її однозначного вибору. Проблема розв'язується процедурою виділення нескінченно тонкого шару, запропонованої і обґрунтованої автором роботи [2]. Суть цієї процедури полягає в тому, що граничний перехід виконується вздовж нормалі до поверхні, завдяки чому мінімізується енергія основного стану розмірного квантування, тобто, енергія конфайнменту. В такий спосіб вдається розділити змінні, які описують рух вздовж поверхні і в перпендикулярному до неї напрямі.

В загальному випадку параметризована поверхня описується системою криволінійних координат. Отже, виникає проблема перетворення операторів динамічних змінних, зокрема оператора кінетичної енергії, тобто, оператора Белтрамі-Лапласа. Крім цього, внаслідок процедури де Коста[2] в операторі Гамільтона з'являється, так званий , геометричний потенціал, який виражається в термінах інваріантів поверхні, а саме, гауссівської і середньої кривизни.

Якщо система перебуває в електромагнітному полі, яке описується векторним, то його дія враховується переходом до узагальненого імпульсу. Внаслідок заміни декартових координат криволінійними координатами на поверхні і в згаданому раніше нескінченно тонкому шарі модифікується векторний потенціал. Проте, в роботі[3] показано, що калібровочна інваріантність в поєднанні з процедурою де Коста дозволяє розглядати рух вздовж поверхні незалежно від руху у поперечному напрямі навіть при наявності магнітного поля.

Описана загальна теорія нами застосована до гелікоїдальної поверхні, яка утворена обертанням прямокутника зі сторонами a і b з одночасним і рівномірним його переміщенням вздовж гвинтової ліній, витягнутої у напрямі осі z. Радіус-вектор частинки, захопленою одержаною в такий спосіб областю, описується співвідношенням:

$$\vec{X}(s,\eta,\xi)=\vec{x}(s)-(\eta b\vec{B}+\xi a\vec{N}) \tag{1}$$

де $\vec{x}(s)-$радіус-вектор точки на гвинтовій лінії, $\vec{B}$ і $\vec{N}-$базисні вектори у площині, перпендикулярній до гвинтової лінії, η і $\eta-$координати частинки у цій площині. З формули (1) відомими методами[4] отримуємо вираз для контраваріантний метричний тензор

$$\hat{g}=Diag\left\{\left[1+ak\xi Cos\theta(s)-bk\eta Sin\theta(s)\right]^2,\ a^2,b^2\right\} \tag{2}$$

в якому $k-$кручення, а $\theta(s)-$кут обертання прямокутника навколо направляючої гвинтової лінії. Після отримання метричного тензору (2) і підстановки його у оператор Белтрамі-Лапласа була виконана процедура переходу до тонкого шару: хвильова функція розкладається у ряд по власних функціях поперечного квантування в полі конфайнменту з подальшим переходом до границі $\tau\to 0$, $b\to 0$. Тут як τ позначена третя координата, відрахована у напрямі зовнішньої нормалі. В результаті матиме місце не тільки виокремлення руху вздовж поверхні, але і конкретизація вигляду геометричного потенціалу.

Магнітна складова оператора Гамільтона, саме яка і була об'єктом дослідження, у криволінійних координатах згідно із[3] має вигляд:

$$\hat{H}_m=\frac{iq\hbar}{2mc\sqrt{g}}\partial_m\left(\sqrt{g}\,g^{mn}A_n\right)-\frac{iq\hbar}{mc}g^{mn}A_m\partial_n+\frac{q^2}{2mc^2}g^{mn}A_mA_n \tag{3}$$

В цьому співвідношенні $g-$детермінант двомірної частини контраваріантного метричного тензору, $g^{mn}-$двомірна частина коваріантного метричного тензора, яка у відповідності з одержаним нами результатом (2) також має діагональну форму, а A_n-компонента векторного потенціалу поля, подана у базисі криволінійних координат. Прийнявши до уваги діагональність метричних тензорів, подамо (3) у остаточній формі

$$\hat{H}_m=\frac{iq\hbar}{2mc\sqrt{g}}\partial_m\left(\sqrt{g}\,g^{mm}A_m\right)-\frac{iq\hbar}{mc}g^{mm}A_m\partial_m+\frac{q^2}{2mc^2}g^{mm}A_m^2 \tag{4}$$

в якій мається на увазі додавання по індексах, які повторюються.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1.Касіяненко В.Х.,Л.І.Карбівска,Н.А.Курган, О.Я.Кузнецова,В.Л.Карбівський, Фізичні властивості гібридних-вірус неорганічних комплек сів ВТМ-Au, Наносистеми, наноматеріали. нанотехнології, !5, №3, 2017, с.157-186

2.Da Costa R.C.T., Quantum Mechanics of a constrained particle, Phys.Rev. A23, 1982, DOI: https://doi.org/10.1103/Phys.RevA23.1982

3.Ferrari Giulio,Cuoghi Giampaolo, Schrödinger Equation for a Particle on a Curved Surface in an Electric and Magnetic Field, Phys.Rev.Letters , 100(23) 230403,2008

4.Погорелов А.В., Дифференциальная геометрия, М., 1969, 167 с.

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

Касіяненко Василь Харитонович*, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця, cassic1955@gmail.com*

Burdeinyy Volodymyr Mefodiyovych, *PhD in Physics and Mathematics, associated professor of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia , brdnvldmr@ukr.net*

Kaccyianenko Vasyl Kharytonovich*, Doctor of Science in Physics and Mathematics, full professor and Chief of General Physics Department, Vinnytsia National Technical Univrsity, Vinnytsia, cassic1955@gmail.com*