

© 1992

БИЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В СПИРАЛЕОБРАЗНОМ ОДНОМЕРНОМ ПРОВОДНИКЕ

О. В. Кубис

Показано, что электростатическое взаимодействие электронов в имеющем форму спирали одномерном проводнике может приводить к образованию стабильных электронных пар. Получены выражения для энергетического спектра и волновых функций биэлектронов.

В одномерный проводник, имеющий форму спирали, поместим два электрона, координаты которых обозначим как (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) . При движении в одномерном проводнике электрон имеет только одну степень свободы, поэтому три пространственные координаты электрона удобно записать как функции одного-единственного параметра α .

В случае спиралеобразного проводника эти функции имеют вид

$$x = R \cos \alpha, \quad y = R \sin \alpha, \quad z = s\alpha/2\pi, \quad (1)$$

где z — координата оси спирали, R — радиус витка спирали, s — шаг спирали. С учетом (1) обычный потенциал электростатического взаимодействия электронов

$$U = q^2 [(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{-1/2} \quad (2)$$

запишется как

$$U = q^2 \left[4R^2 \sin^2 \left(\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} \right) + \frac{s^2 (\alpha_1 - \alpha_2)^2}{4\pi^2} \right]^{-1/2},$$

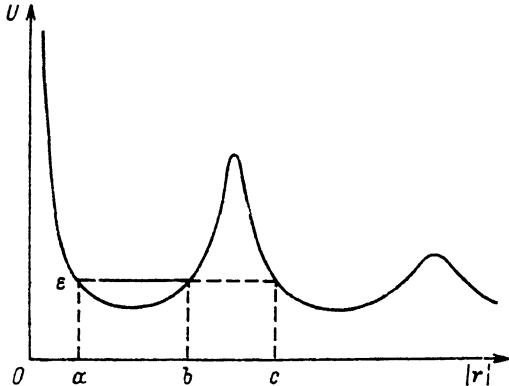
где q — заряд электрона.

Принимая во внимание, что длина дуги спирали, заключенной между двумя электронами, равна $|\alpha_1 - \alpha_2| \sqrt{R^2 + s^2/4\pi^2}$, и вводя обозначение длины одного витка спирали $l = 2\pi \sqrt{R^2 + s^2/4\pi^2}$, получим

$$U(r) = (q^2/R) [4 \sin^2(\pi r/l) + (sr/Rl)^2]^{-1/2}, \quad (3)$$

где $r = r_1 - r_2$, а r_1 и r_2 — координаты электронов, отсчитанные вдоль проводника.

Поместим два электрона в один виток спирали. Тогда взаимодействие электронов, описываемое потенциалом (3), приведет к образованию биэлектронного состояния с энергией ϵ (см. рисунок). Это состояние, вообще говоря, является метастабильным и может распасться благодаря туннелированию электронов через запирающий потенциальный барьер, в связи с чем электроны разлетятся по разным виткам. Поэтому наряду с энергией ϵ характеристикой биэлектронного состояния будет являться время жизни τ . Решая уравнение Шредингера



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right) \psi + U(r_1 - r_2) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (4)$$

получим выражение для волновой функции электронной пары

$$\psi = \varphi(r, t) \exp \left[\frac{\pm i \sqrt{2\mu E}}{\hbar} (r_1 + r_2) \right] \exp \left[\frac{-iE}{\hbar} t \right], \quad (5)$$

где $\mu = m/2$ — приведенная масса электронной пары, m — масса электрона в одномерном проводнике, E — кинетическая энергия движения центра масс электронной пары (знаки « \pm » соответствуют двум возможным направлениям движения центра масс), а функция $\varphi(r, t)$ удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \varphi(r, t)}{\partial r^2} + U(r) \varphi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(r, t)}{\partial t}. \quad (6)$$

В первом приближении пренебрежем вероятностью туннелирования электронов через потенциальный барьер ($\tau \rightarrow \infty$), что соответствует быстрому убыванию φ при удалении от точек поворота a и b в классически недоступную область $|r| < a$ и $|r| > b$. В этом случае решение уравнения (6) при $R/s \gg 1$ дает выражение для энергетического спектра биэлектрона

$$\varepsilon_n = q^2/2R + \hbar\omega (n + 1/2), \quad (7)$$

$$\omega = q/2 \sqrt{mR^3}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

справедливое при $Rq^2m/\hbar^2 (n + 1/2)^2 \gg 1$, а удовлетворяющая перестановочной симметрии функция $\varphi(r, t)$ определяется выражением

$$\begin{aligned} \varphi_n^\pm(r, t) = & \left(\frac{m\omega}{8\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left(-\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar} \right) \left\{ H_n \left[(r - \pi R) \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \right] \times \right. \\ & \times \exp \left[-\frac{m\omega}{4\hbar} (r - \pi R)^2 \right] \pm (-1)^n H_n \left[(r + \pi R) \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \right] \times \\ & \left. \times \exp \left[-\frac{m\omega}{4\hbar} (r + \pi R)^2 \right] \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

справедливым при $||r| - \pi R| \ll \pi R$. Здесь $H_n(x)$ — полином Эрмита, а знаки « $-$ » и « $+$ » соответствуют случаям параллельных и антипараллельных спинов взаимодействующих электронов.

Выясним теперь, насколько справедливо сделанное при выводе (7)—(8) допущение о малой вероятности распада биэлектронного состояния. В квазиклассическом приближении вероятность распада биэлектронного состояния ε_n в единицу времени

$$\lambda_n = \frac{1}{T_n} \exp \left[-\frac{2}{h} \int_b^c \sqrt{2\mu (U(r) - \varepsilon_n)} dr \right], \quad (9)$$

где

$$T_n = \sqrt{2\mu} \int_a^b \frac{dr}{\sqrt{\varepsilon_n - U(r)}} \quad (10)$$

есть квазиклассический период движения биэлектрона в пространстве относительной координаты r . Нетрудно видеть, что предэкспоненциальный множитель в (9) имеет смысл числа «соударений» биэлектрона с точкой поворота b в единицу времени, а экспонента в (9) есть квазиклассическое выражение коэффициента прозрачности для потенциального барьера, запирающего электроны в одном витке, и, таким образом, соотношение (9) в самом деле имеет смысл вероятности распада биэлектрона в единицу времени. Аналитическое вычисление по формуле (9) с потенциалом (3) не представляется возможным, поэтому необходимо сделать некоторые упрощения. По смыслу решаемой задачи (о корректности предположения малости λ_n) нас вполне удовлетворит получение аналитической формулы для верхней оценки λ_n . Поэтому при вычислении интеграла в показателе экспоненты (9) заменим потенциал (3) фиктивным потенциалом

$$\tilde{U}(r) = \begin{cases} q^2/2R + q^2(r - \pi R)^2/16R^3, & b \leq r \leq 2\pi R, \\ q^2/2R + q^2(r - 3\pi R)^2/16R^3, & 2\pi R \leq r \leq c. \end{cases} \quad (11)$$

Поскольку потенциал (11) удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} \tilde{U}(r) &= U(r) \quad \text{при } r = b \text{ и } r = c, \\ \tilde{U}(r) &< U(r) \quad \text{при } b < r < c, \end{aligned}$$

то из (9) сразу получаем формулу для верхней оценки λ_n

$$\lambda_n < \frac{1}{T_n} \exp \left[-\frac{2}{h} \int_b^c \sqrt{2\mu (\tilde{U}(r) - \varepsilon_n)} dr \right]. \quad (12)$$

Учитывая, что $\tau_n = 1/\lambda_n$, получим из (12) после вычислений

$$\tau_n > \frac{8hR(n+1/2)}{q^2\pi} \left[\frac{2h(n+1/2)}{\pi^2 q \sqrt{Rm}} \right]^{2n} \exp \left(\frac{q\pi^2 \sqrt{Rm}}{2h} \right). \quad (13)$$

Из (13) следует, что τ_n сильно зависит от геометрических размеров спирали, быстро возрастая с увеличением R . Оценки показывают, что вероятность распада биэлектрона существенна лишь при сверхмалых размерах R . Так, подставляя в (13) для оценки времени жизни основного биэлектронного состояния τ_0 субмолекулярный размер $R \sim 10^{-6}$ см, получим огромное время жизни $\tau_0 > 10^{15}$ с, в связи с чем ранее сделанное предположение о малой вероятности распада биэлектрона оказывается справедливым фактически во всем диапазоне значений геометрических размеров спиралеобразного проводника, которые могут быть реализованы *in vivo*. Отметим также, что в связи с малой вероятностью туннелирования электронов через запирающий потенциальный барьер в области $-a \leq r \leq a$ обменный интеграл рассматриваемой двухэлектронной системы очень мал. В квазиклассическом приближении величина обменного расщепления энергетического уровня ε_p

$$\Delta_n = \frac{2h}{T} \exp \left(-\frac{1}{h} \int_{-a}^a \sqrt{m [U(r) - \varepsilon_n]} dr \right). \quad (14)$$

Используя потенциал (11), получим соотношение

$$\Delta_n < \left[\frac{q^3 h}{8 \sqrt{mR^5} (n + 1/2)} \right]^{1/2} \left[\frac{\pi^2 q \sqrt{Rm}}{2h (n + 1/2)} \right]^n \exp \left[-\frac{q\pi^2 \sqrt{Rm}}{4h} \right], \quad (15)$$

откуда следует, что при $R \geq 10^{-6}$ см спиновое расщепление $\Delta_0 \leq 10^{-17}$ эВ. Таким образом, состояния биелектрона с полным спином $S=0$ и $S=\pm 1$ имеют практически одну и ту же энергию, как это и следует из (7)—(8).

На основании проведенного анализа можно сказать, что биелектрон представляет собой практически стабильную двухэлектронную молекулу, которая, согласно (5), способна как единое целое перемещаться вдоль проводника. Нетрудно видеть, что при больших значениях r потенциал (3) превращается в обычный отталкивающий потенциал кулоновского типа $U \propto 1/r$. Это означает, что при достаточно малых концентрациях биелектронов на единицу длины проводника соседние двухэлектронные молекулы будут двигаться независимо, отталкиваясь друг от друга.

Суммируя вышеизложенное, можно сказать, что в одномерных проводниках со сложной геометрией обычное электростатическое взаимодействие может привести к образованию бозевского газа стабильных биелектронных молекул. Среди объектов, в которых возможно проявление описанных эффектов, особое внимание заслуживают биологические структуры, молекулы которых (в частности, молекула ДНК) могут иметь спиралеобразную форму.

Новосибирский
электротехнический институт

Поступило в Редакцию
28 июня 1992 г.