05

Геометрический потенциал в гигантских фуллеренах

© Н.Р. Садыков, Н.В. Юдина

Снежинский физико-технический институт — филиал Национального исследовательского ядерного университета „МИФИ“,
456776 Снежинск, Челябинская обл., Россия
e-mail: n.r.sadykov@rambler.ru

Поступило в Редакцию 20 февраля 2019 г.
В окончательной редакции 4 сентября 2019 г.
Принято к публикации 23 сентября 2019 г.

Исследовано в одноэлектронном приближении движение электронов в гигантском фуллерене за счет геометрического потенциала. Показано, что геометрический потенциал за счет изгибного возбуждения кривизны вызывает дополнительную нормальную поверхностную силу, что влияет на механизм малых поверхностных колебаний гигантского фуллерена. Учет геометрического потенциала для гигантских фуллеренов приводит к уменьшению или полной компенсации эффекта свободных поперечных (радиальных) колебаний сферического слоя.

Ключевые слова: геометрический потенциал, гигантские фуллерены, поверхностные колебания, деформация наноструктур, одноэлектронное приближение, движение электронов.

DOI: 10.21883/JTF.2020.03.48921.62-19

Введение

Наноструктуры, представляющие собой различные двумерные геометрические объекты, обладают уникальными свойствами, что вместе с прогрессом в производстве этих структур делает актуальными исследования свойств композитных сред на основе наночастиц. Одним из уникальных свойств таких двумерных объектов является квантовый геометрический потенциал, т. е. зависимость потенциальной энергии системы от чисто геометрических параметров поверхности.

Геометрический потенциал имеет квантовое происхождение, поскольку он пропорционален квадрату постоянной Планка h. Такая закономерность приводит к тому, что физические эффекты начинают проявляться в нанометровом масштабе.

В реальных системах с радиусом кривизны порядка не более сотен нанометров величина геометрического потенциала все еще очень мала и имеет масштаб энергии меньше одного Кельвина, что препятствует экспериментальной реализации и эксплуатации многих феноменальных явлений [1–7]. Гигантские фуллерены и нанотрубки являются наночастицами, которые имеют радиус кривизны поверхности масштаба 10 nm. Для таких наночастиц геометрический потенциал может влиять на их частоту поверхностных колебаний. Геометрический потенциал за счет давления изгибного возбуждения кривизны вызывает дополнительную нормальную поверхностную силу. Для фуллеренов и нанотрубок актуальность исследования поверхностных колебаний определяется весьма малой изученностью феномена в области столь малых размеров и сантиметровым диапазоном длин излучаемых волн. Такое излучение позволяет производить картографирование высокого разрешения, управление воздушным движением на коротких дистанциях, создание специальных радаров и может быть использовано в РЛС аэропортов при создании и распознании ложных мишеней при радиолокации. Природа поверхностных колебаний наночастиц имеет различную природу. Например, для нанотрубок с полупроводниковым типом проводимости продольные осцилляции могут обусловливаться модулем Юнга [8,9]. В [8] при исследовании полевой эмиссии из нанотрубок в присутствии высокочастотного электрического поля на частотных характеристиках эмиссионного тока обнаружены серии узких пиков в диапазоне частот 50–1200 MHz, что авторы связывают с резонансом первой и второй гармоник вынужденных гармонических колебаний углеродных нанотрубок в высокочастотном электрическом поле. В [9] проведены аналогичные исследования для длинных углеродных нанонитей (нанотрубок) в сильном постоянном и слабом переменном электрических полях в области частот в несколько сотен килогерц (обнаружена серия узких пиков с добротностью до 1100). Модуль Юнга для свободных от примесей нанотрубок был получен в ряде работ с применением различных экспериментальных методик. В работе [10] это было сделано на основе исследования амплитуды тепловых колебаний концов нанотрубки, в [11] — исследованием деформации изгиба с помощью атомного силового микроскопа. Экспериментальный результат для модуля Юнга лежит в пределах одного TPa. Это близко к значениям модуля Юнга для графита, однако экспериментальные ошибки достаточно велики. Большой разброс имеет место и в теоретических оценках [12] (см. также [13]). В [14] обнаружено, что модуль упругости как функция диаметра резко уменьшается (от 1 до 0.1 TPa) с увеличением диаметра (от 8 до 40 nm).

Сама процедура квантования системы с тонкими стенками, введенная в [15] и обобщенная в [16] (метод Jensen–Koppe–da Costa или JKC), рассматривает квантовое движение на искривленной двумерной ($2D$) поверхности как предельный случай частицы в трехмерном ($3D$) пространстве. В рамках метода JKC квантовые носители теперь могут эволюционировать в двумерном пространстве при наличии индуцированного кривизной квантового геометрического потенциала.

В настоящей работе нас будет интересовать влияние на механизм колебания фуллерена геометрического потенциала, т.е. потенциала, имеющего чисто геометрическое происхождение [15–19].

Геометрический потенциал на двумерной поверхности

Поскольку геометрический потенциал пропорционален квадрату постоянной Планка h, такая закономерность приводит к тому, что физические эффекты начинают проявляться в нанометровом масштабе. В таком масштабе геометрический потенциал может вызывать интригующие феноменальные явления [1–7]. В [1] исследовано влияние деформации поверхности цилиндрической квантовой проволоки на локализацию поверхностных состояний, и вычислена энергия этих локализованных состояний, зависящая от характеризующих поверхность параметров. На ограниченной периодической криволинейной поверхности на квантовую частицу геометрический потенциал действует как топологический кристалл [2]. В [3] показано, что число связанных состояний определяется малым и большим радиусами тора. В [4] и [6] определены собственные состояния и связанные с ними собственные значения энергии для квантово-механической частицы, ограниченной оболочкой Мебиуса. Показано, что учет вклада кривизны в кинетическую энергию приводит к расщеплению дважды вырожденного основного состояния и существенно изменяет форму волновых функций основного и возбужденного состояний. В [5] показано, что для изогнутых цилиндров с различными радиусами геометрический потенциал сильно влияет на квантовые характеристики пропускания исследуемых структур. Феноменальные явления возникают с геометрическим потенциалом также в случае спирально свернутых наноструктур, что приводит к появлению скрученных связанных состояний [6,7].

Чтобы описать геометрический потенциал в отличие от работы [16], индексы контрвариантных компонент любого вектора в криволинейной системе координат будем писать сверху, а у ковариантных компонент будем писать снизу. По аналогии с [16] введем криволинейную систему координат

$$\mathbf{R}(q^1,q^2,q^3)=\mathbf{r}(q^1,q^2)+q^3\hat{\mathbf{N}}(q^1,q^2), \tag{1}$$

где $\mathbf{r}(q^1,q^2)$ — определяет точки двумерной поверхности (двумерный метрический тензор $g_{ij}=(\partial\mathbf{r}/\partial q^i)(\partial\mathbf{r}/\partial q^j)$, $i,j=1,2$), $\hat{\mathbf{N}}(q^1,q^2)$ — является единичной нормалью к поверхности в рассматриваемой точке. Выпишем уравнение Вейнгартена (Weingarten qwuation)

$$\frac{\partial\hat{\mathbf{N}}}{\partial q^i}=\sum_{j=1}^{2}\alpha_i^j\,\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial q^j}, \tag{2}$$

где $i=1,2$, вектор $\partial\mathbf{r}/\partial q^j$ является базисным ковектором двумерной системы координат. Уравнение Вейнгартена отражает тот факт, что вектор $\hat{\mathbf{N}}$ в любой точке поверхности является единичным вектором, поэтому приращение этого вектора будет линейной комбинацией двух базисных (линейно независимых) векторов.

В (2) тензорные коэффициенты α_i^j могут быть выражены через метрический тензор g^{mj} (первая квадратичная форма) размерности два и коэффициенты второй квадратичной формы b_{im}

$$\alpha_i^j=-\sum_{m=1}^{2}b_{im}g^{mj}, \tag{3}$$

где

$$\hat{\mathbf{N}}\,\frac{\partial^2\mathbf{r}}{\partial q^j\partial q^j}\Big|_{q^3=0}=b_{ij}. \tag{4}$$

Действительно, из равенства $\hat{\mathbf{N}}\partial\mathbf{r}/\partial q^j=0$ с учетом (2) и (4) получаем

$$\frac{\partial\hat{\mathbf{N}}}{\partial q^i}\,\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial q^j}=\sum_{k=1}^{2}\alpha_i^k\,\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial q^k}\,\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial q^j}=\sum_{k=1}^{2}\alpha_i^k g_{kj}=-b_{ij}. \tag{5}$$

Из (5) следует равенство (3). Тензор g^{mj} в (3) можно выразить по аналогии с работой [16] через первую квадратичную форму g_{mj} с учетом равенства $\sum_{m=1}^{2}g_{im}g^{mj}=g_i^j=\delta_i^j$:

$$\alpha_1^1=\frac{1}{g}(g_{12}b_{21}-g_{22}b_{11}),\quad \alpha_1^2=\frac{1}{g}(b_{11}g_{21}-b_{21}g_{11}),$$

$$\alpha_2^1=\frac{1}{g}(g_{22}b_{12}-b_{12}g_{22}),\quad \alpha_2^2=\frac{1}{g}(b_{21}g_{11}-b_{22}g_{11}), \tag{6}$$

где δ_i^j — дельта-символ Кронекера.

Равенства (6) позволяют установить связь между определителями матриц $\det\alpha_i^j$ и $\det b_{im}$

$$\det\alpha_i^j=-\det b_{im}/g. \tag{7}$$

Здесь и далее g является определителем двумерного тензора g_{ij}. Равенство (7) можно получить также непосредственно из равенства (3), воспользовавшись определителем произведения двух матриц. Исходя из коэффициентов первой и второй квадратичных форм g_{ij}, b_{ij} и используя уравнение из работы [20]

$$\begin{vmatrix} b_{11}-\lambda g_{11} & b_{12}-\lambda g_{12}\\ b_{21}-\lambda g_{21} & b_{22}-\lambda g_{22}\end{vmatrix}=0, \tag{8}$$

получим выражения для величин главных кривизн λ_1, λ_2. Сумма и произведение главных кривизн определяет среднюю $\lambda_1 + \lambda_2$ и кривизну Гаусса $\lambda_1\lambda_2$ соответственно

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \frac{g_{11}b_{22} + g_{22}b_{11} - g_{12}b_{21} - g_{21}b_{12}}{g},$$

$$\lambda_1\lambda_2 = \frac{\det b_{im}}{g}. \quad (9)$$

Из (1) с учетом (2) и (3) следует выражение для трехмерного метрического тензора G_{ijh} [20]

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^j} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^j} + q^3 \frac{\partial \hat{\mathbf{N}}}{\partial q^i} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^j} - q^3 \sum_{m=1}^{2} b_{im} g^{mj} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^j},$$

$$G_{ij} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^j}$$

$$= g_{ij} - q^3(b_{ij} + b_{ji}) + (q^3)^2 \left(\sum_{k,p=1}^{2} b_{ik} g^{kp} b_{jp} \right). \quad (10)$$

Из (10) следует выражение для определителя трехмерного метрического тензора G_{ij}

$$G = g - 2q^3[b_{11}g_{12} + b_{22}g_{11} - 2b_{12}g_{21}]$$

$$+ 4(q^3)^2 \det b_{ij} + (q^3)^2 g \left(\sum_{m,n,k,p=1}^{2} g^{mn} b_{nk} g^{kp} b^T_{pm} \right), \quad (11)$$

где $b^T_{pm} = b_{mp}$. С учетом (9) определитель трехмерного метрического тензора из (11) преобразуем к виду

$$G = g \Bigg[1 - 2q^3(\lambda_1 + \lambda_2) + 4(q^3)^2 \lambda_1\lambda_2$$

$$+ (q^3)^2 \left(\sum_{m,n,k,p=1}^{2} g^{mn} b_{nk} g^{kp} b^T_{pm} \right) \Bigg]. \quad (12)$$

В случае криволинейной системы координат (1) представим элементарный объем по аналогии с работой [16] в виде функциональной зависимости

$$dV = f(q^1, q^2, q^3) dS dq^3, \quad (13)$$

где $dS = \sqrt{g} dq^1 dq^2$. Поскольку в соответствии с дифференциальной геометрией [20], $dV = \sqrt{G} dq^1 dq^2 dq^3$, из (12) и (13) следует

$$f = \sqrt{\frac{G}{g}} = \Bigg\{ 1 - 2(\lambda_1 + \lambda_2) q^3 + 4\lambda_1\lambda_2 (q^3)^2$$

$$+ (q^3)^2 \left(\sum_{m,n,k,p=1}^{2} g^{mn} b_{nk} g^{kp} b^T_{pm} \right) \Bigg\}^{1/2}$$

$$= 1 - (\lambda_1 + \lambda_2) q^3 - \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2)^2 (q^3)^2 + 2\lambda_1\lambda_2 (q^3)^2$$

$$+ \frac{1}{2}(q^3)^2 \left(\sum_{m,n,k,p=1}^{2} g^{mn} b_{nk} g^{kp} b^T_{pm} \right), \quad (14)$$

где при выводе G разложили в ряд Тейлора с точностью до величины $(q^3)^2$ включительно.

Чтобы вычислить последнее слагаемое в правой части (14), перейдем в данной точке поверхности к двумерной ортогональной системе координат, причем базисные векторы направим вдоль главных кривизн. В такой системе коэффициенты первой и второй квадратичных форм g^{mj} и b_{im} будут иметь вид

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} g^{11} & 0 \\ 0 & g^{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{g} \begin{pmatrix} g_{22} & 0 \\ 0 & g_{11} \end{pmatrix}, \quad b_{ij} = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 \\ 0 & b_{22} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Из (15) следует

$$g^{mn} b_{nk} g^{kp} b^T_{pm} = (g^{11}b_{11})^2 + (g^{22}b_{22})^2. \quad (16)$$

С учетом (2) и (3) получаем

$$g^{11}b_{11} = \frac{1}{h_1^2} \left| \mathbf{e}_1 \frac{\partial \hat{\mathbf{N}}}{\partial q^1} \right| = \frac{1}{h_1} \left| \frac{\partial \hat{\mathbf{N}}}{\partial q^1} \right| = \lambda_1, \; g^{22}b_{22} = \lambda_2. \quad (17)$$

С учетом (17) функция f из (14) преобразуется к виду

$$f = 1 - (\lambda_1 + \lambda_2) q^3 + \lambda_1\lambda_2 (q^3)^2. \quad (18)$$

Из (18) в соответствии с [16] следует выражение для величины геометрического потенциала

$$V_S = -\frac{h^2}{8m} \left[\frac{1}{f^2} \left(\frac{\partial f}{\partial q^3} \right)^2 - \frac{2}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial (q^3)^2} \right] \Bigg|_{q^3=0}$$

$$= -\frac{h^2}{8m} \left[(\lambda_1 + \lambda_2)^2 - 4\lambda_1\lambda_2 \right] = -\frac{h^2}{8m} (\lambda_1 - \lambda_2)^2. \quad (19)$$

Геометрический потенциал для фуллерена

Рассмотрена модель, когда фуллерен слабо деформирован вдоль выделенной оси, в результате чего поверхность превращается в сфероид. В результате величины главных кривизн в произвольных точках возмущенной поверхности фуллерена различаются ([20]), что, в свою очередь, приводит к наличию геометрического потенциала для частицы в уравнении Шредингера [16] .

Для рассматриваемого случая введем криволинейную систему координат

$$x^1 = (R_0 + \xi + x) \sin\theta \cos\phi,$$

$$x^2 = (R_0 + \xi + x) \sin\theta \sin\phi,$$

$$x^3 = (R_0 + \xi + x) \cos\theta, \quad (20)$$

где R_0 — радиус гигантского фуллерена, $\xi = \xi_0 Y_{l=2,m=0}(\theta, \varphi)$ — смещение поверхности фуллерена вдоль радиуса, $\xi_0 = \text{const}$, $\xi_0 \ll R$, $Y_{l=2,m=0} = \sqrt{5/(16\pi)}(1 - 3\cos^2\theta)$ — сферическая функция. В (20) при $x = 0$ мы получаем поверхность возмущенного эллипсоида. Введенные в (20) по аналогии с формулой (1) координаты (θ, ϕ, ξ) выполняют роль переменных

$$\theta = q^2, \quad \phi = q^2, \quad x = q^3. \tag{21}$$

Для определения главных кривизн эллипсоида сначала определим в точке $q^3 = 0$ с помощью (20) базисные векторы $\mathbf{e}_\alpha = \partial \mathbf{r}/\partial q^\alpha$ в криволинейной системе координат (20):

$$\mathbf{e}_1|_{x=0} = \partial \mathbf{R}/\partial q^1|_{x=0} =$$
$$\Big((R+\xi)\cos\theta\cos\phi + 3\xi_0\sqrt{5/(4\pi)}\sin^2\theta\cos\theta\cos\phi,$$
$$(R+\xi)\cos\theta\sin\phi + 3\xi_0\sqrt{5/(4\pi)}\sin^2\theta\cos\theta\sin\phi,$$
$$-(R+\xi)\sin\theta + 3\xi_0\sqrt{5/(4\pi)}\sin\theta\cos^2\theta\Big),$$
$$\mathbf{e}_2|_{x=0} = \partial \mathbf{R}/\partial q^2|_{x=0} =$$
$$\Big(-(R+\xi)\sin\theta\sin\phi, (R+\xi)\sin\theta\cos\theta, 0\Big),$$
$$\mathbf{e}_3|_{x=0} = \partial \mathbf{R}/\partial q^3 = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta). \tag{22}$$

Из (22) следует выражение для коэффициентов первой квадратичной формы (метрический тензор на поверхности фуллерена)

$$g_{\alpha\beta} = G_{\alpha\beta}|_{x=0} =$$
$$\begin{pmatrix} (R+\xi)^2 + \frac{45}{4\pi}\xi_0^2\sin^2\theta\cos^2\theta, & 0 \\ 0, & (R+\xi)^2\sin^2\theta \end{pmatrix}, \tag{23}$$

где $\alpha, \beta = 1, 2$.

Теперь определим коэффициенты для второй квадратичной формы

$$\mathbf{m}\,\frac{\partial^2 \mathbf{R}}{\partial q^\alpha \partial q^\beta}\bigg|_{b_{\alpha\beta}}, \tag{24}$$

где $\mathbf{m}$ — единичный перпендикулярный к поверхности фуллерена вектор. Из (24) с учетом (22) получаем

$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q^1 \partial q^1}\bigg|_{x=0} = \left[-(R+\xi) + 3\xi_0\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\cos 2\theta\right]\mathbf{e}_1$$
$$+ 3\,\frac{\xi_0}{R}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sin 2\theta\mathbf{e}_3|_{x=0}, \quad \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q^1 \partial q^2}\bigg|_{x=0} = 0, \tag{25}$$
$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q^2 \partial q^1}\bigg|_{x=0} = 0,$$
$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q^2 \partial q^2}\bigg|_{x=0} = -(R+\xi)(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, 0).$$

Из (24) и (25) следует выражение для коэффициентов второй квадратичной формы

$$b_{\alpha\beta} =$$
$$\begin{pmatrix} -(R+\xi) + 3\xi_0^2\sqrt{5/(4\pi)}\cos 2\theta & 0 \\ 0, & -(R+\xi)\sin^2\theta \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Исходя из выражений (23) и (26) для коэффициентов первой и второй квадратичных форм и используя уравнение [20]

$$\begin{vmatrix} b_{11} - \lambda g_{11} & b_{12} - \lambda g_{12} \\ b_{21} - \lambda g_{21} & b_{22} - \lambda g_{22} \end{vmatrix} = 0, \tag{27}$$

получим величины главных кривизн поверхности фуллерена с точностью до ξ_0^2

$$\lambda_1 = -\frac{1}{R+\xi} + 3\,\frac{\xi_0}{R^2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\cos 2\theta, \quad \lambda_2 = -\frac{1}{R+\xi}. \tag{28}$$

Из (28) получаем величину разности главных кривизн для поверхности возмущенного фуллерена с точностью до ξ_0

$$\lambda_1 - \lambda_2 = -3\,\frac{\xi_0}{R^2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\cos 2\theta. \tag{29}$$

Влияние геометрического потенциала на поверхностные колебания фуллерена

Для того чтобы получить уравнения колебаний поверхности гигантского фуллерена, с помощью стационарной теорий возмущения определим изменение энергии всей конфигурации электронов в случае сфероидально деформированного фуллерена за счет геометрического потенциала (29). Потом покажем, что аналогичный результат можно получить на основе нестационарной теории возмущения, если учесть, что резонансная частота колебания фуллерена удовлетворяет условию $\Delta t = T \ll 1/\omega_{ij}$.

Для этого сначала в соответствии со стационарной теорией возмущения вычислим среднее значение геометрического потенциала для фуллерена в одночастичном приближении по различным состояниям электронов (поправка к уровню энергии в первом порядке теории возмущения [21])

$$E_{lm} = E_{lm}^{(0)} + V_{lm,lm}, \quad C_{lm}^{(0)} = 1, \quad C_{lm}^{(1)} = 0,$$
$$C_{l'm}^{(0)} = 0, \quad C_{l'm}^{(1)} = \frac{V_{l'm,'m}}{E_{lm}^{(0)} - E_{l'm}^{(0)}}, \tag{30}$$

где в пренебрежении радиальной частью волновой функции фуллерена решение в одноэлектронном приближении будем искать в виде волновой функции ротатора с соответствующими собственными значениями энергии

$$\Psi_{lm}^{(0)} = \Lambda_{lm}^{(0)}(\theta)\exp(im\varphi), \quad \Lambda_{lm}^{(0)} = Y_{lm}(\theta),$$
$$E_{lm}^{(0)} = \frac{h^2}{2m_eR^2}\,l(l+1),$$
$$-\frac{h^2}{2m_eR^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Lambda_{lm}^{(0)} =$$
$$E_{lm}^{(0)}(\theta)\Lambda_{lm}^{(0)}(\theta). \tag{31}$$

В (30) и (31) $\xi = \cos\theta$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$. В (30) $V_{l'm,lm}$ являются матричными элементами геометрического потенциала V_S (в соответствии с (19) потенциал не зависит от азимутального угла, поэтому вырождение по магнитному числу m не снимается). В (31) величина m_eR^2 выполняет роль момента инерции. Чтобы вычислить среднее значение функции $(\cos 2\theta)^2$ по различным состояниям электронов, воспользуемся равенством [22]

$$\xi Y_{lm}(\xi) = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} Y_{l+1,m}(\xi) + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} Y_{l-1,m}(\xi),$$

$$Y_{lm}(\xi)\cos 2\theta =$$

$$= 2\sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}}\sqrt{\frac{(l+2)^2 - m^2}{4(l+2)^2 - 1}}\, Y_{l+2,m}(\xi)$$

$$+ \left[2\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1} + 2\,\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1} - 1\right] Y_{l,m}(\xi)$$

$$+ 2\sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}}\sqrt{\frac{(l-1)^2 - m^2}{4(l-1)^2 - 1}} Y_{l-2,m}(\xi). \tag{32}$$

С учетом ортогональности сферических функций

$$\int_{-1}^{1} Y^*_{lm} Y_{l'm'}\, d\xi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}|l, m\rangle$$

из (32) получаем в первом порядке теории возмущения поправку к энергии уровня $|l, m\rangle$

$$E^{(1)}_{lm,lm} = V_{lm,lm} = -\frac{45h^2}{8\pi m_e}\left(\frac{\xi_0}{R}^2\right)^2$$

$$\times \left\{ \frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}\,\frac{(l+2)^2 - m^2}{4(l+2)^2 - 1} + \left[\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}\right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1} - 1\right]^2 + \frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}\,\frac{(l-1)^2 - m^2}{4(l-1)^2 - 1}\right\}. \tag{33}$$

Тогда из (33) с учетом (32) получаем среднее значение геометрического потенциала, приходящегося на один электрон, как функцию ξ_0

$$\langle V_S\rangle = \frac{1}{(l_0+1)^2}\sum_{l=0}^{l_0}\sum_{m=-1}^{l} V_{lm,lm}$$

$$= -\frac{45h^2}{32\pi m_e}\left(\frac{\xi_0}{R^2}\right)^2 \langle(\cos 2\theta)^2\rangle. \tag{34}$$

Поскольку $|V_{l'm,lm}|/|E^{(0)}_{lm} - E^{(0)}_{l'm}| \ll 1$, можно пренебречь $C^{(1)}_{l'm}$, т. е. в случае стационарной теории возмущения получаем только поправку к энергии уровня $|l, m\rangle$.

Результат, аналогичный (33), следует из нестационарной теории возмущения в первом порядке, если масштаб изменения Δt матричных элементов $V_{l'm,lm}$ удовлетворяет условию $\Delta t \ll h/|E^{(0)}_{lm} - E^{(0)}_{l'm}|$ (происходит адиабатическое, т. е. медленное изменение приложенного возмущения (геометрического потенциала))

$$ih\,\frac{\partial C^{(1)}_{lm}(t)}{\partial t} = V_{lm,lm},$$

$$ih\,\frac{\partial C^{(1)}_{l'm}(t)}{\partial t} = V_{l'm,lm}\exp\bigl(-i\bigl[(E^{(0)}_{lm} - E^{(0)}_{l'm})t\bigr]/h\bigr), \tag{35}$$

т. е. по аналогии со стационарной теорией возмущения пренебрежем вторым уравнением в (35) (можно считать $C^{(1)}_{l'm}(t) = 0$). Из первого уравнения (35), при выполнении условия $Jm(E^{(0)}_{lm}) = \lambda > 0$, $\lambda \to 0$ следует

$$C_{lm}(t) = \exp\left(-\frac{i}{h}[E^{(0)}_{lm}t]\right) + \int_{-\infty}^{t} V_{lm,lm}dt$$

$$\approx \exp\left(-\frac{i}{h}\int_{-\infty}^{t}(E^{(0)}_{lm} + V_{lm,lm})dt\right), \tag{36}$$

что позволяет заключить, что квазиэнергия состояния $|l, m\rangle$ имеет вид $E_{lm}(t) = E^{(0)}_{lm} + V_{lm,lm}(t)$ (совпадает с (30)).

В одночастичном приближении при колебательном движении поверхности возмущенного фуллерена Лагранжиан запишется

$$L = \frac{M(\xi_0)^2}{2} + \frac{45h^2}{32\pi m_e}\langle(\cos 2\theta)^2\rangle\frac{\xi_0^2}{R^4}, \tag{37}$$

где M — масса ядра углерода.

Из (37) следует уравнение „колебания“ для гигантского фуллерена

$$\frac{\partial^2\xi_0}{\partial t^2} + \frac{45h^2}{16\pi M m_e R^4}\langle(\cos 2\theta)^2\rangle_{\xi_0} = 0. \tag{38}$$

Из (38) видно, что решение будет затухать или усиливаться по экспоненциальному закону

$$\xi_0 \sim \exp(-\kappa t), \quad \kappa = \left[\frac{45h^2\langle(\cos 2\theta)^2\rangle}{16\pi m_e M R^4}\right]^{1/2}. \tag{39}$$

Данный эффект приводит к уменьшению или полной компенсации эффекта свободных колебаний сферического слоя за счет модуля Юнга W при деформации поверхности в поперечном направлении [23]:

$$\frac{\partial^2\xi_1}{\partial t^2} + \frac{h^2 W}{12\rho(1-\chi^2)}\,\Delta^2_\perp\xi_1 = 0, \tag{40}$$

где h — толщина фуллерена, $\Delta_\perp$ — двухмерный оператор Лапласа на двумерной поверхности $\mathbf{r}(q^1, q^2)$, ρh — масса, приходящаяся на единицу площади фуллерена (поверхностная плотность массы), χ — коэффициент Пуассона. Если в (40) положить $\xi_1 \sim Y_{lm}(\theta)$, то с учетом сферических координат (21) оператор $\Delta_\perp$ из (40) можно записать с помощью углового оператора Лапласа

$$\Delta_\perp \xi_1 = R^{-2}\Delta_{\theta\phi}\xi_1 = -l(l+1)\xi_1/R^2. \quad (41)$$

При $l = 2$ из (38) и (40) с учетом (39) и (41) следует уравнение колебания для основной моды

$$\frac{\partial^2 \xi_1}{\partial t^2} + \omega^2 \xi_1 = 0,$$

$$\omega_0 = \left[\frac{3h^2 W}{\rho(1-\chi^2)R^4}\right]^{1/2}, \quad \omega = (\omega_0^2 - \kappa^2)^{1/2}. \quad (42)$$

Из (38) и (42) следует, что поверхностные колебания фуллерена при деформации отсутствуют при выполнении условия $\omega_0 = \kappa$.

Обсуждение результатов

При решении задачи на основе теории возмущения реализуются несколько различных случаев [24]: наличие слабого внешнего поля или слабое взаимодействие между частицами; немалые возмущения $\hat{V}$, действующие в течение малого времени τ (возникает малый параметр $\xi \sim |V|\tau$); случай адиабатического приближения, когда возмущение изменяется за времена много большие, чем характерные периоды T рассматриваемой системы (возникает малый параметр $\xi \sim 1/(\omega\tau)$, где $\omega = 2\pi/T$); случай нескольких вырожденных состояний, либо наличие в системе нескольких состояний с близкими значениями уровней энергии; возмущение граничных условий, в частности, в случае планарной, цилиндрической и сферической геометрий. Перечисленные случаи теорий возмущений позволяют рассмотреть такие квантовые процессы, как задача рассеяния частиц, задача ионизации при β — распаде и ионизации при ядерных столкновениях; позволяют описать такие эффекты, как эффект Мессбауера, эффект Зеемана, эффект Штарка и др. В случае возмущения граничных условий реализуется поучительная ситуация для световодов с периодически возмущенной сердцевиной [25]. В случае осесимметричных световодов волновое уравнение, описывающее эволюцию излучения, совпадает с нестационарным уравнением Шредингера, где роль времени выполняет продольная координата, а „оператор Гамильтона“ определяется профилем показателя преломления. В работе [26] показано, что при выполнении условий слабой связи в случае периодических возмущений, зависящих от продольной координаты не по гармоническому закону, может реализоваться случай сильной связи. Используемая в настоящей работе теория возмущения относится к случаю возмущенных граничных условий, где в случае слабо возмущенной поверхности фуллерена $\xi_0 \ll R$ можно воспользоваться собственными значениями и собственными функциями пространственного ротатора (31) (в этом случае пренебрегаем толщиной сферического слоя h), либо воспользоваться программами для вычисления собственных значений и собственных функций сферического слоя (например, [27]). Результаты настоящей работы можно обобщить на случай вытянутых фуллеренов, воспользовавшись сфероидальной (ортогональной) системой координат.

Приведем численные оценки влияния геометрического потенциала на величину поверхностных колебаний фуллерена. Пусть радиус гигантского фуллерена $R = 7\,\text{nm}$. В этом случае $l_0 \approx 32\pi R^2/(3\sqrt{3}b^2) \approx 218$, $\langle(\cos 2\theta)^2\rangle \approx 0.47$, где $b = 1.42 \cdot 10^{-10}\,\text{m}$. Из (39) следует, что $\kappa \approx 1.04 \cdot 10^{10}\,\text{s}^{-1}$. При $W = 1.3\,\text{TPa}$, толщина слоя фуллерена $h = 0.1\,\text{nm}$, $\rho = 8M/(3\sqrt{3}b^2 h)$, $b = 0.142\,\text{nm}$, $M = 2 \cdot 10^{-26}\,\text{kg}$ — масса атома углерода, $\chi = 0$, циклическая частота колебаний поверхности фуллерена $\omega_0 \approx 4 \cdot 10^{10}\,\text{s}^{-1}$ без учета геометрического потенциала, что в четыре раза больше величины κ из (39). Частота ω_0 соответствует длине электромагнитной волны $\lambda \approx 4.7\,\text{cm}$ в вакууме.

Рассмотренная задача перекликается с задачей колебания поверхностей капелек за счет поверхностного натяжения. Такая задача является актуальной при радиолокационном зондировании макро- и микрообъектов, составной частью которых является капелька. Это, например, облака, туманы, смоги. В случае заряженных частиц осцилляции капель приводят к радиоизлучению конвективных облаков [28–30]. В работе [28] техника расчета основывалась на законе сохранения энергии и дисперсионном уравнении задачи и не позволила определить тип излучения (дипольное, квадрупольное или магнитно-дипольное). В [29] задача решена для жидкости с учетом ее кинематической вязкости ν, а в [30] гидродинамические расчеты проведены с учетом второго порядка малости. Учет диссипативных процессов внутри капли приводит тому, что существует минимальный радиус $R \geq 50\pi^2\nu^2\rho/(3\sigma) \approx 2.3 \cdot 10^{-6} \approx 2.3\,\mu\text{m}$, при котором еще возможно устойчивое резонансное колебание за счет поверхностного натяжения. Если радиус уменьшить, то капля начинает распадаться на более мелкие капли. При $R = 2.3\,\mu\text{m}$ частота колебаний $\omega_n \approx 1.9 \cdot 10^5\,\text{s}^{-1}$ для основной моды $n = 2$, где имеет место

$$\omega_n = \left[n(n-1)(n+2)\sigma/(\rho R^3)\right]^{1/2}, \quad (43)$$

где σ и ρ — коэффициент поверхностного натяжения и плотность воды соответственно. Величина ω_n в случае капелек на пять порядков меньше, чем в случае гигантского фуллерена. Такая разница объясняется малым радиусом гигантского фуллерена по сравнению с минимальным радиусом капли воды. Если в (43) вместо радиуса капли $R = 2.3\,\mu\text{m}$ при $n = 2$ и том же значении величины σ/ρ подставить радиус $R = 7\,\text{nm}$ гигантского фуллерена, то частота колебаний капли будет равна $\omega_{n=2} \approx 1.1 \cdot 10^9\,\text{s}^{-1}$, что уже только на $1-2$ порядка меньше частоты колебания фуллерена.

Рассмотренная в работе задача индуцирования геометрического потенциала за счет изгибного возбуждения кривизны двумерной поверхности в значительной степени перекликается с задачей деформации тонких эластичных наноструктур [31]. В экспериментальной работе [31] показано, что возбуждение кривизны сводится к нормальной поверхностной силе, подобной давлению, но вызывающей вращающий момент вдоль границы оболочки. Из-за тонкой геометрии эластичные оболочки наноструктур показывают интригующие механические неустойчивости. Возможно, наиболее знаковым примером является изгиб сферической оболочки под давлением — ситуация, часто приводящая к разрушению конструкций [32]. Чтобы описать механику тонких структур с произвольными возбуждающими факторами, классическую механику оболочек можно распространить на модельные тела, которые не имеют конфигурации без напряжений [33–35], что приводит к неевклидовой теории оболочек [36]. Несмотря на прогресс [37,38], роль влияния изменений за счет кривизны тонких структур и их взаимодействия с геометрическими параметрами возмущения и нестабильностью в тонких изначально изогнутых оболочках, остается недостаточно понятной.

Поскольку в нашем случае смещение является функцией времени, в этом случае по аналогии со спиновой связностью, нужно воспользоваться четырехмерной криволинейной системой координат в пространстве Минковского. Например, такой подход в [39] позволил исследовать эффект Zitterbewegung в топологическом изоляторе и бислое графена с нитридом бора в обычных координатах.

Заключение

При толщине потенциального слоя $h \approx 10^{-10}\,\mathrm{m} \approx 1\,\text{Å}$ фуллерена имеет место $\kappa/\omega_0 \approx 0.26$ (геометрический потенциал приводит к уменьшению частоты поверхностных колебаний фуллерена за счет модуля Юнга W в $\sqrt{\omega_0^2 - \kappa^2}/\omega_0 \approx 0.965$ раз), и в случае малых деформаций не зависит от радиуса фуллерена. Малые размеры фуллерена по сравнению с наименьшим размером капелек жидкости приводят к тому, что частота поверхностных колебаний для гигантского фуллерена будет на пять порядков больше, чем в случае капелек жидкости.

В случае малых колебаний $\kappa \sim 1/R$, $\omega_0 \sim 1/R$. Если бы при увеличении величины деформации ξ_0 выполнялось условие $\omega_0 = \kappa$, то реализовалось бы условие равновесия при сфероидальной деформированной поверхности гигантского фуллерена. Это, в свою очередь, означало бы, что геометрический потенциал приводит к различным деформациям наноструктур [40,41]. При выполнении условия $\kappa/\omega_0 > 1$ сфероид был бы неустойчив, что по аналогии с критерием Рэлея для заряженных капелек привело бы к распаду сфероида [42,43]. Возможно, что рассмотренная в работе задача является одним из механизмов деформаций различных наноструктур.

Финансирование работы

Авторы выражают благодарность за поддержку со стороны Национального исследовательского ядерного университета МИФИ (Московский инженерно-физический институт) в рамках проекта „Российское Академическое превосходство" (контракт № 02.A03.21.0005. 27.08.2013).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] *Cantele G., Ninno D., Iadonisi G.* // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 61. P. 3730. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.13730

[2] *Aoki H., Koshino M., Takeda D., Morise H., Kuroki K.* // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 65. P. 035102. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.035102

[3] *Encinosa M., Mott L.* // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 68. P. 014102. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.68.014102

[4] *Gravesen J., Willatzen M.* // Phys. Rev. A. 2005. Vol. 72. P. 032108. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.032108

[5] *Marchi A., Reggiani S., Rudan M., Bertoni A.* // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 035403. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.035403

[6] *Ведерников А.И., Чаплик А.В.* // ЖЭТФ. 2000. Т. 117. № 2. Р. 449–451. http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/r/index/r/117/2/p449?a=list [*Vedernikov A.I., Chaplik A.V.* // JETP. 2000. Vol. 90. N 2. P. 397–399. DOI: https://doi.org/10.1134/1.559116]

[7] *Ortix C., van den Brink J.* // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81. P. 165419. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.165419

[8] *Мусатов А.Л., Израэльянц К.Р., Благов Е.В.* // Письма в ЖЭТФ. 2014. Вып. 99. № 4. Р. 250–254. DOI: 10.7868/S0370274X14040109 http://www.jetpletters.ac.ru/ps/2032/article_30637.shtml [*Musatov A.L., Izrael'yants K.R., Blagov E.V.* // JETP Lett. 2014. Vol. 99. N 4. P. 224–228. DOI: https://doi.org/10.1134/S0021364014040110]

[9] *Израэльянц К.Р., Орлов А.П., Мусатов А.Л., Благов Е.В.* // ФТТ. 2016. Т. 58. Вып. 5. Р. 987–990. http://journals.ioffe.ru/articles/43056

[10] *Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M.* // Nature. 1996. Vol. 381. P. 678–680. DOI: https://doi.org/10.1038/381678a0

[11] *Wong E.W., Sheehan P.E., Lieber C.M.* // Science. 1997. Vol. 277:5334. P. 1971–1975. DOI: https://doi.org/10.1126/science.277.5334.1971

[12] *Iijima S., Brabec C., Maiti A., Bernholc J.* // J. Chem. Phys. 1996. Vol. 104. N 5. P. 2089. DOI: https://doi.org/10.1063/1.470966

[13] *Елецкий А.В.* // УФН. 2007. Т. 177. Вып. 3. С. 233–274. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0177.200703a.0233 [*Eletskii A.V.* // Phys. Usp. 2007. Vol. 50. P. 225–261. DOI: 10.1070/PU2007v050n03ABEH006188]

[14] *Poncharal P., Wang Z.L., Ugarte D., de Heer W.A.* // Science. 1999. Vol. 283:5407. P. 1513–1516. DOI: https://doi.org/10.1126/science.283.5407.1513

[15] *Jensen H., Koppe H.* // Ann. Phys. 1971. Vol. 63. N 2. P. 586–591. DOI: https://doi.org/10.1016/0003-4916(71)90031-5
[16] *Costa R.C.T.* // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 23. N 4. P. 1982–1987. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.23.1982
[17] *Chaplik A.V., Blick R.H.* // New J. Phys. 2004. Vol. 6. P. 33. DOI: https://doi.org/10.1088/1367-2630/6/1/033
[18] *Ogawa N., Fujii K., Kobushukin A.* // Prog. Theor. Phys. 1990. Vol. 83. N 5. P. 894–905. DOI: https://doi.org/10.1143/PTP.83.894
[19] *Chaplik A.V.* // JETP Lett. 2004. Vol. 80. N 2. P. 130–132. DOI: https://doi.org/10.1134/1.1804223
[20] *Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т.* Современная геометрия: методы и приложения. 2-е изд., перераб. М.: Физматлит., 1986. 760 с.
[21] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2004. Т. 3 (нерелятивистская теория). 800 с.
[22] *Никифоров А.Ф., Уваров В.Б.* Специальные функции математической физики. М.: Мир, 1979. 342 с.
[23] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Теория упругости. М.: Физматлит, 2007. Т. 7. 259 с. [*Landau L.D., Lifshitz E.M.* Theory of Elasticity. Vol. 7 of Course of Theoretical Physics. Pergamon Press, Oxford/New York 1987.]
[24] *Мигдал А.Б.* Качественные методы в квантовой теории. М.: Физматлит, 1975. 336 с.
[25] *Снайдер А., Лав Дж.* Теория оптических волноводов. М.: Радио и связь, 1987. 656 с.
[26] *Дремов В.В., Садыков Н.Р.* // Опт. и спектр. 1996. Т. 80. № 5. С. 814–820.
[27] *Юдина Н.В., Садыков Н.Р.* // Журн. неорган. химии. 2019. Т. 64. № 1. С. 72–81. DOI: https://doi.org/10.1134/S0044457X19010215 http://sciencejournals.ru/contents/nergkhim/2019/nergkhim1_19v64cont.pdf [*Yudina N.V., Sadykov N.R.* // Rus. J. Inorganic Chem. 2019. Vol. 64. N 1. P. 98–107. DOI: https://doi.org/10.1134/S0036023619010212]
[28] *Калечиц В.И., Нахутин И.Е., Полуэктов П.П.* // ДАН СССР. 1982. Т. 262. № 6. С. 1344–1347. http://mi.mathnet.ru/dan45102
[29] *Григорьев А.И., Ширяева С.О.* // Изв. РАН МЖГ. 2002. № 5. С. 67–73. http://mzg.ipmnet.ru/ru/Issues.php?y=2002&n=5&p=67
[30] *Ширяева С.О.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 4. С. 15–22. http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/40098
[31] *Pezzulla M., Stoop N., Steranka M.P., Bade A.J., Holmes D.P.* // Phys. Rev. Lett. 2018. Vol. 120. N 4. P. 048002. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.048002
[32] *Koiter W.T.* // Proc. K. Ned. Akad. Wet. Ser. B: Phys. Sci. 1969. Vol. 72. P. 40.
[33] *Gurtin M.E., Fried E., Anand L.* The Mechanics and Thermodynamics of Continua. England, Cambridge: Cambridge University Press, 2010. 694 p.
[34] *Amara M.B., Goriely A.* // J. Mech. Phys. Solids. 2005. Vol. 53. N 10. P. 2284–2319. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmps.2005.04.008
[35] *Goriely A., Amar M. Ben.* // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 198103. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.198103
[36] *Efrati E., Sharon E., Kupferman R.* // J. Mech. Phys. Sol. 2009. Vol. 57. N 4. P. 762–775. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmps.2008.12.004
[37] *Armon S., Efrati E., Kupferman R., Sharon E.* // Science. 2011. Vol. 333:6050. P. 1726–1730. DOI: https://doi.org/10.1126/science.1203874
[38] *Pezzulla M., Smith G.P., Nardinocchi P., Holmes D.P.* // Soft Matter. 2016. Vol. 12. N 19. P. 4435–4442. DOI: https://doi.org/10.1039/C6SM00246C
[39] *Конобеева Н.Н., Белоненко М.Б.* // Известия вуз. Физика. 2016. Т. 59. № 6. С. 119–124.
[40] *Магарилл Л.И., Энтин М.В.* // ЖЭТФ. 2003. Т. 123. Вып. 4. С. 867–876. http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/r/index/r/123/4/p867?a=list [*Magarill L.I., Éntin M.V.* // JETP. 2003. Vol. 96. N 4. P. 766–774. DOI: https://doi.org/10.1134/1.1574549]
[41] *Entin M.V., Magarill L.I.* // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 66. P. 205308. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.205308
[42] *Lord Rayleigh F.R.S.* // Phil. Mag. 2009. Vol. 14:87. N 1882. P. 184–186. DOI: https://doi.org/10.1080/14786448208628425
[43] *Hendricks C.D., Schneider J.M.* // J. Amer. Phys. 1963. Vol. 31. N 6. P. 450–453. DOI: https://doi.org/10.1119/1.1969579