

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ,
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

УДК: 544.2

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА НА СОБСТВЕННУЮ
ФУНКЦИЮ И СОБСТВЕННОЕ ЗНАЧЕНИЕ ЭНЕРГИИ СОСТОЯНИЯ
В СКРУЧЕННОЙ УЗКОЙ ГРАФЕНОВОЙ НАНОЛЕНТЕ

© 2023 г. Н. Р. Садыков^{а,*}, Ю. А. Петрова^а, И. А. Пилипенко^а, Р. С. Храбров^а, С. Н. Скрыбин^а

^аСнежинский физико-технический институт национального исследовательского ядерного университета “МИФИ”,
Снежинск, 456776 Челябинская область, Россия

*e-mail: n.r.sadykov@rambler.ru

Поступила в редакцию 21.05.2022 г.

После доработки 11.07.2022 г.

Принята к публикации 20.07.2022 г.

Исходя из введенной геликоидальной системы координат для скрученной в виде геликоида наноленты получено выражение для эффективного геометрического потенциала. На основе эффективного геометрического потенциала для уравнения Шредингера исследована графеновая нанолента конечной длины с краями типа “кресло”, находящаяся под действием внешнего электрического поля, параллельного краям наноленты, рассчитаны уровни энергии и волновые функции электронов в окрестности точки Дирака. Показано, что в поперечном направлении существует единственное состояние.

Ключевые слова: геометрический потенциал, скрученные наноленты, уравнение Вейнгартена, модель kr -типа

DOI: 10.31857/S004445372302022X, EDN: ELHIFX

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 эффективный геометрический потенциал (ГП) [1, 2], т.е. зависимость потенциальной энергии системы от чисто геометрических параметров поверхности. Геометрический потенциал имеет квантовое происхождение, поскольку он пропорционален квадрату постоянной Планка $\hbar$. Такая закономерность приводит к тому, что физические эффекты начинают проявляться в нанометровом масштабе. В реальных системах с радиусом кривизны порядка 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 [3–9]. Фуллерены и нанотрубки являются наночастицами, которые имеют радиус кривизны поверхности масштаба 1–10 нм. Для таких наночастиц геометрический потенциал может влиять на их частоту поверхностных колебаний [10]. Геометрический потенциал за счет давления изгибного возбуждения кривизны вы-

зывает дополнительную нормальную поверхностную силу. Для фуллеренов и нанотрубок актуальность исследования поверхностных колебаний определяется весьма малой изученностью феномена в области столь малых размеров и нанометровым диапазоном длин излучаемых волн.

Другой наночастицей, для которых геометрический потенциал приводит к феноменальным эффектам, являются скрученные наноленты. В работах [11–17] исследованы электронно-транспортные свойства скрученных графеновых нанолент. В работе [11] с учетом экспериментальных результатов [12] рассматривают наноленту как непрерывный объект, не принимая во внимание какую-либо дискретность основной гексагональной решетки. Свойства свободных электронов в геликоидальной геометрии в случае Шредингеровских материалов рассматривались в работах [2, 13, 14]. Результаты, основанные на уравнении Дирака для удерживаемой квантовой частицы на подмножестве в $\mathbb{R}_3$ приведены в работах [15–18].

В случае нанотрубок геометрический потенциал может влиять на характер движения носителей заряда. Такая задача является актуальной в хиральной спинтронике [19–23]. В настоящее время ведутся интенсивные исследования свойств нанотрубок на основе силицена и герма-

нена. Нанотрубки из силицена (SiNT) синтезированы [24] в 2001 г., и с тех пор сообщалось о различных процессах роста SiNT. SiNT предлагается использовать для создания полевых транзисторов, волноводов, оптоэлектронных элементов, для замены графита в литий-ионных аккумуляторах, для создания гетеропереходов путем соединения углерода и кремниевых нанотрубок [25–28]. Влияние геометрического потенциала будет проявляться при неосесимметричном движении частиц в нанотрубках, что эквивалентно наличию проекции орбитального момента у носителей заряда на ось нанотрубки. Это в свою очередь приводит к снятию вырождения по спину в нанотрубках за счет спин-орбитального взаимодействия [23].

В данной работе исследовано влияние геометрического потенциала на электронно-транспортные свойства скрученных графеновых кресельных нанолент в продольном электрическом поле. По аналогии с [29, 12] в этой работе воспользуемся моделью кр-типа.

1. Геометрический потенциал свободных электронов на геликоиде

Получим зависимость потенциальной энергии системы от чисто геометрических параметров в случае геликоиды. Для этого воспользуемся результатами работ [2, 10].

Сначала трехмерная криволинейная система координат имеет вид

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

где q^1, q^2, q^3 – контрвариантные координаты трехмерной системы координат, $\mathbf{r}(q^1, q^2)$ определяет точки двумерной поверхности, $\hat{\mathbf{N}}(q^1, q^2)$ является единичной нормалью к поверхности в рассматриваемой точке (более подробно см. [10]). Введение трехмерной системы (1) с помощью единичной нормали $\hat{\mathbf{N}}(q^1, q^2)$ позволяет воспользоваться уравнением Вейнгартена [30]. Тот факт, что двумерная поверхность однозначно определяется с помощью координат q^1, q^2 , означает, что существует двумерная система координат с базисными векторами $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ и метрическим тензором $g_{\alpha\beta}$ размерности 2 (первая квадратичная форма)

$$\mathbf{e}_\alpha = \partial \mathbf{r} / \partial q^\alpha, \quad \mathbf{e}_\beta = \partial \mathbf{r} / \partial q^\beta, \quad g_{\alpha\beta} = \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta, \quad (2)$$

где $\alpha, \beta = 1, 2$. Аналогично для трехмерной системы координат следуют выражения для базисных

векторов $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ и метрического тензором G_{ij} размерности 3

$$\mathbf{e}_i = \partial \mathbf{R} / \partial q^i, \quad \mathbf{e}_j = \partial \mathbf{R} / \partial q^j, \quad G_{ij} = \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j, \quad (3)$$

где $i, j = 1, 2, 3$.

Для удобства математических выкладок в дальнейшем в (1) будем считать, что как в двумерной, так и трехмерной криволинейных системах координат для контрвариантных компонент радиус-вектора

$$q^1 = u, \quad q^2 = v, \quad q^3 = \xi. \quad (4)$$

Исключением будет тот факт, когда нам нужно будет перейти к ковариантным компонентам радиус-вектора.

Согласно [2] (см. также [10]) учет параметров двумерной поверхности приводит к следующему выражению для геометрического потенциала

$$V_s = -\frac{\hbar^2}{8m_e} \left[\frac{1}{f^2} \left(\frac{\partial f}{\partial q^3} \right)^2 - \frac{2}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial (q^3)^2} \right]_{\xi=0} = -\frac{\hbar^2}{8m_e} [(\lambda_1 + \lambda_2)^2 - 4\lambda_1\lambda_2] = -\frac{\hbar^2}{8m_e} (\lambda_1 - \lambda_2)^2, \quad (5)$$

где величины главных кривизн λ_1, λ_2 поверхности являются решением уравнения [30, 31]

$$\begin{vmatrix} b_{11} - \lambda g_{11} & b_{12} - \lambda g_{12} \\ b_{21} - \lambda g_{21} & b_{22} - \lambda g_{22} \end{vmatrix} = 0. \quad (6)$$

В (6) метрический тензор двумерной поверхности и тензор $b_{\alpha\beta}$ – это первая и вторая квадратичные формы, соответственно; $f = \sqrt{G/g}$, $dS = \sqrt{g} du dv$ – элементарная площадь двумерной поверхности, $dV = \sqrt{G} du dv d\xi$ – элементарный объем, G и g – определители метрических тензоров G_{ij} и $g_{\alpha\beta}$.

Квантовое состояние для свободных электронов на геликоидальной поверхности с учетом эффективного геометрического потенциала исходя из двумерного уравнения Шредингера

Здесь мы изучаем геликоидальную поверхность, чтобы получить представление о взаимодействии между квантовыми частицами и кривизной в случае скрученной наноленты, а также возникающих в результате этого возможных физических эффектах (структура скрученной графеновой наноленты с краями типа “кресло” приведена на рис. 1). Электронно-транспортные свойства скрученных графеновых нанолент исследовались ранее в работах [11–17]. Следуя да Коста [2] получим эффективный геометрический потенциал (5) в двумерном уравнении Шредингера. Для этого по аналогии с работой [32] с учетом

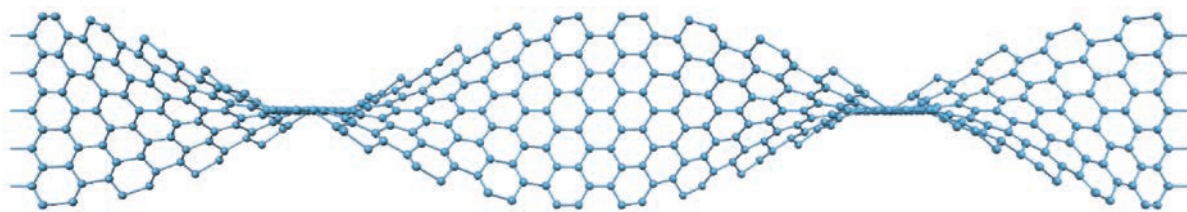


Рис. 1. Геликоидально скрученная нанолента.

обозначений (4) сначала введем геликоидальную систему координат

$$\begin{aligned} x^1 &= u \cos(\kappa v) + \xi \sin(\kappa v), \\ x^2 &= u \sin(\kappa v) - \xi \cos(\kappa v), \quad x^3 = v + \kappa u \xi, \end{aligned} \quad (7)$$

где x^1, x^2, x^3 — декартовы координаты; du, dv, ξ — геликоидальные координаты; координата x^3 направлена вдоль нанополоски; $\kappa = 2\pi/L$, L есть длина кручения. Исходя из хорошо известных связей между базисными векторами и координатами [30], запишем базисные векторы для геликоидальной системы координат

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{e}}_1 &= \partial \mathbf{r} / \partial u = (\cos(\kappa v), \sin(\kappa v), \kappa \xi), \\ \tilde{\mathbf{e}}_2 &= \partial \mathbf{r} / \partial v = (\kappa[-u \sin(\kappa v) + \xi \cos(\kappa v)], \\ &\quad \kappa[u \cos(\kappa v) + \xi \sin(\kappa v)], 1), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\tilde{\mathbf{e}}_3 = \partial \mathbf{r} / \partial \xi = (\sin(\kappa v), -\cos(\kappa v), \kappa u).$$

Из (8) следует выражение для метрического тензора $\tilde{G}_{ij} = \tilde{\mathbf{e}}_i \tilde{\mathbf{e}}_j$ геликоидальной системы координат

$$\tilde{g}_{ij} = \begin{pmatrix} 1 + \kappa^2 \xi^2 & 2\kappa \xi & \kappa^2 \xi u \\ 2\kappa \xi & 1 + \kappa^2 [u^2 + \xi^2] & 0 \\ \kappa^2 \xi u & 0 & 1 + \kappa^2 u^2 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где при $\xi = 0$, $\tilde{G} = \det \tilde{G}_{ij} = [1 + \kappa^2 u^2]^{1/2}$. Из (9) следует, что геликоидальная система координат (7) при $\xi = 0$ является ортогональной.

Геликоидальная система координат (7) позволяет записать уравнение поверхности скрученной нанополоски $\mathbf{r}(u, v)$, края которой представляет собой спирали относительно оси симметрии ξ . Такая поверхность представляет собой геликоид $\mathbf{r}(u, v)$, который в обозначениях с работой [2] <https://www.msn.com/ru-ru/feed> описывается уравнением из (1) при $q^3 = 0$ или описывается системой координат (7) при $\xi = 0$

$$\mathbf{r}(u, v) = (x^1, x^2, x^3) = (u \cos[\kappa v], u \sin[\kappa v], v). \quad (10)$$

Из (8) и (9) следует, что между базисным вектором $\tilde{\mathbf{e}}_\xi$ системы координат (7) и нормалью $\hat{\mathbf{N}}$ из (1) к геликоиду существует связь

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{N}} &= \frac{1}{[1 + (\kappa u)^2]^{1/2}} \tilde{\mathbf{e}}_\xi \Big|_{\xi=0} = \\ &= \frac{1}{[1 + (\kappa u)^2]^{1/2}} (\sin(\kappa v), -\cos(\kappa v), \kappa u). \end{aligned} \quad (11)$$

Чтобы перейти из системы координат (7) к системе координат (1), нужно с учетом (10) предположить $dq^3 = h_3 d\xi$, где $h_3 = (1 + \kappa^2 (u^2))^{1/2}$ — коэффициент Ламэ [33] системы координат (9).

При $\xi = 0$ из (9) следует двумерная геликоидальная система координат с метрическим тензором $g_{\alpha\beta}$ (первая квадратичная форма), а также вторая квадратичная форма $b_{\alpha\beta}$ [30]

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta} &= \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^\alpha} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + (\kappa u)^2 \end{pmatrix}, \\ b_{\alpha\beta} &= \hat{\mathbf{N}} \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} \Big|_{q^3=0} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-\kappa}{[1 + (\kappa u)^2]^{1/2}} \\ \frac{-\kappa}{[1 + (\kappa u)^2]^{1/2}} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12)$$

Из (6) и (11) получим выражения для величин главных кривизн λ_1, λ_2

$$\lambda_1 = -\lambda_2 = \kappa / [1 + (\kappa u)^2]. \quad (13)$$

Это приводит к следующему выражению для геометрического потенциала

$$V_S = -\frac{\hbar^2}{8m_e} (\lambda_1 - \lambda_2)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\kappa^2}{[1 + (\kappa u)^2]^2}. \quad (14)$$

Из выражения для потенциала следует, что собственное значение энергии изолированного состояния будет отрицательной величиной.

Исходя из первой квадратичной формы $g_{\alpha\beta}$ из равенств (12) для шредингеровских материалов [2, 13, 14] с учетом выражения (14) для геометрического потенциала получим для частицы уравне-

ние для волновой функции с учетом продольного электрического поля W

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial(u)^2} + \frac{\kappa^2 u}{1 + (\kappa u)^2} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\kappa^2}{[1 + (\kappa u)^2]^2} \right] \Psi + \frac{1}{[1 + (\kappa u)^2]} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial(v)^2} = -\frac{2m_e}{\hbar^2} (E + |e|Wv) \Psi. \quad (15)$$

В данной работе мы рассматриваем узкие наноленты с кресельными краями с шахматной конфигурацией N -AGNRs, где $N = 11$ [29, 34, 35]. В этом случае при $m = (N - 1)/2 = 5$ ширина наноленты $H = m\sqrt{3}b \approx 1.23$ нм, где $b = 0.142$ нм – расстояние между атомами углерода в графене. При длине периода геликоидальной наноленты $L = 10H$ следует, что $[1 + (\kappa q_{\max}^1)^2] \approx 1.05$, где $q_{\max}^1 = H/2$, $\kappa L = 2\pi$. Таким образом при выполнении условия $\kappa q_{\max}^1 \ll 1$ для уединенной нанополоски уравнение (15) приближенно может быть решено методом разделения переменных

$$\Psi = \Phi_1(u)\Phi_2(v),$$

$$\frac{\partial^2}{\partial v^2} \Phi_2 = -\frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_1 + |e|Wv) \Phi_2, \quad (16)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial(u)^2} + \frac{\kappa^2 u}{1 + (\kappa u)^2} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\kappa^2}{[1 + (\kappa u)^2]^2} \right] \Phi_1 = -\frac{2m_e}{\hbar^2} E_1 \Phi_1,$$

с краевыми условиями $\Phi_2(v = \pm L/2) = 0$, $\partial\Phi_1(u = \pm H/2)/\partial u = 0$, где L и H – длина и ширина наноленты, E и E_1 – энергии постоянной величины. В случае необходимости точность расчетов можно уточнить, если воспользоваться теорией возмущения [36].

Решение функции Φ_2 первого уравнения в (16) выражается через функции Эйри $Ai(\zeta)$ и $Bi(\zeta)$ [37, 36]

$$\Phi_2(\zeta) = C_1 Ai(\zeta) + C_2 Bi(\zeta), \quad (17)$$

где C_1 и C_2 есть постоянные величины,

$$\zeta = (2m_e |e|W/\hbar^2)^{1/3} [v + (E - E_1)/|e|W],$$

$$\left[\frac{2m_e |e|W}{\hbar^2} \right]^{1/3} \left[-\frac{L}{2} + \frac{(E - E_1)}{|e|W} \right] \leq \zeta \leq \left[\frac{2m_e |e|W}{\hbar^2} \right]^{1/3} \left[\frac{L}{2} + \frac{(E - E_1)}{|e|W} \right], \quad \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} \Phi_2 = -\zeta \Phi_2.$$

Найдем решение второго уравнения в (16). Введем новую переменную $\varsigma = \tanh(\sqrt{2}\kappa u)$ и, исходя из условия $(\kappa u)^2 \ll 1$ для нанополосок, вто-

рое уравнение Шредингера из (16) преобразуем к виду

$$\frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \varsigma^2} - \frac{3\varsigma}{2(1-\varsigma^2)} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \varsigma} + \frac{m_e E_1/(\hbar\kappa)^2 + (1-\varsigma^2)/2}{(1-\varsigma^2)^2} \Phi_1 = 0, \quad (18)$$

где $V_S = -\hbar^2 \kappa^2 (1 - \varsigma^2)/(2m_e)$, $\cosh(\sqrt{2}\kappa q^1) \approx 1 + (\kappa u)^2$.

Уравнение (18) является обобщенным уравнением гипергеометрического типа [37]

$$\frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \varsigma^2} + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \varsigma} + \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2} \Phi_1 = 0, \quad (19)$$

где $\sigma = 1 - \varsigma^2$, $\tilde{\tau} = -3\varsigma/2$, $\tilde{\sigma} = (1 - \varsigma^2)/2 + m_e E_1/(\hbar\kappa)^2$. Обобщенное уравнение гипергеометрического типа (19) легко сводится к уравнению гипергеометрического типа

$$(1 - \varsigma^2) \frac{\partial^2 y}{\partial \varsigma^2} + \left(-2\varsigma - \varsigma \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{4m_e E_1}{(\hbar\kappa)^2}} \right) \frac{\partial y}{\partial \varsigma} + \left(\frac{m_e E_1}{(\hbar\kappa)^2} + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{4m_e E_1}{(\hbar\kappa)^2}} \right) y = 0, \quad (20)$$

где

$$\Phi_1 = y(\varsigma)\varphi(\varsigma), \quad \varphi = C(1 - \varsigma^2)^{\left(\frac{1}{8} + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{4m_e E_1}{(\hbar\kappa)^2}}\right)}. \quad (21)$$

Результаты расчетов

Была проведена серия расчетов для узких нанолент с кресельными краями с шахматной конфигурацией [29, 34, 35]. В расчетах для нанополосок с кресельными краями с шахматной конфигурацией N -AGNRs, где $N = 11$, полагалось, что $m = (N - 1)/2 = 5$, ширина наноленты $H = 5\sqrt{3}b \approx 1.23$ нм, $b = 0.142$ нм, период геликоидальной наноленты $L = 10H$, $-H/2 \leq u \leq H/2$, $\kappa L = 2\pi$. Следует сказать, что на данный момент времени на основе технологии осаждения из газовой фазы синтезированы графеновые нанополоски с кресельными краями 7-AGNR с симметричной конфигурацией шириной $H = 3\sqrt{3}b$.

Из результатов расчетов следует, что в поперечном направлении существует только одно стационарное состояние $|n = 1\rangle$ при выполнении второго краевого условия $\partial\Phi_1(u = \pm H/2)/\partial u = 0$, уровень энергии которого равняется $E_{1,n=1} = 0.3(V_S)_{\max} = -\frac{0.3\hbar^2 \kappa^2}{2m_e} = -3 \times 10^{-3}$ эВ. При выполнении первого краевого условия $\Phi_1(u = \pm H/2)u = 0$ стационарное состояние $|n = 1\rangle$ отсутствует. Последнее объясняется малым значением ширины H наноленты. Действительно, при отсутствии кручения и при выполнении первого краевого

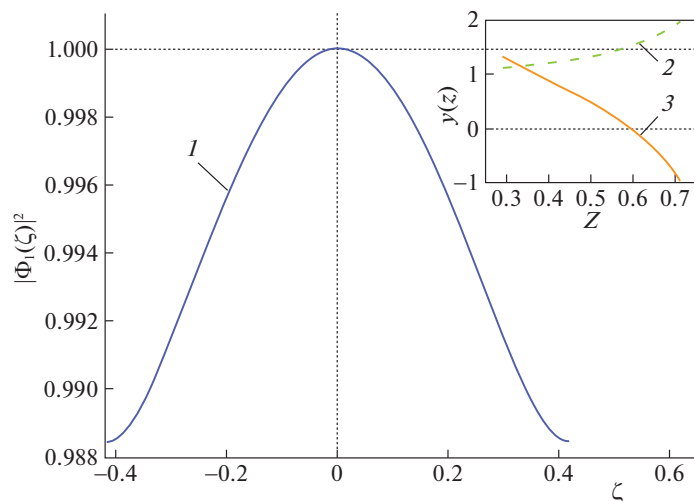


Рис. 2. Зависимость собственной функции $|\Phi_1(z)|^2$ основного состояния $E_{1,n=0} = -3 \times 10^{-3}$ эВ от z .

условия на границе наноленты $\Phi_1(u = \pm H/2) = 0$ из (16) следует оценка величины уровня энергии $|E_1| \sim 2\pi^2 \hbar^2 / (mH^2) \approx 1$ эВ, что значительно больше энергии $E_{1,n=1} = 0.3(V_S)_{\max} = -3 \times 10^{-3}$ эВ стационарного состояния $|n=1\rangle$, чем когда выполняется второе краевое условие на краю наноленты. На рис. 2 приведена зависимость квадрата от модуля собственной функции $|\Phi_1(\zeta)|^2$ (кривая 1) основного состояния $E_{1,n=1}$ от ζ , где $\zeta = \tanh(\sqrt{2}ku)$, u — поперечная координата. На вставке приведена зависимость гипергеометрической функции $y(z)$ от переменной z , где $z = (1 - \zeta)/2$. Два решения гипергеометрического уравнения (20) были определены внутри круга $|z| < 1$ гипергеометрическими рядами [37, 36]

$$y_1 = F(\alpha, \beta, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots, \quad (22)$$

$$y_2 = z^{1-\gamma} F(\beta - \gamma + 1, \alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z). \quad (23)$$

Штриховая кривая 2 соответствует первому решению y_1 из (22) гипергеометрического уравнения (20); сплошная кривая 3 соответствует второму решению y_2 из (23).

5. Заключение

Таким образом, в работе вычислен геометрический потенциал (14) на геликоидальной поверхности, максимальное значение которого порядка $\max|V_S| = \hbar^2 \kappa^2 / (2m_e) = 10^{-2}$ эВ при периоде геликоиды $L = 12.3$ нм, ширине наноленты

$H = 0.1L$, где $\kappa = 2\pi/L$. Аналитически показано, что главные кривизны геликоидальной поверхности равны по абсолютной величине и противоположены по знаку. Это приводит к тому, что величина геометрического потенциала значительно больше, чем в случае деформированной сферической возмущенной поверхности [10]. В случае узкой ленты задача решается методом разделения переменных, причем в поперечном направлении существует единственное изолированное состояние. Уровень энергии изолированного состояния является отрицательной величиной: при $L = 12.3$ нм имеет место $E_{n=1} = 0.3(V_S)_{\max} = -3 \times 10^{-3}$ эВ.

В работе [29] исходя из двух- и четырехточечной элементарной ячейки на основе непрерывной модели кр-типа (the continuum model of kр-type) показано, что при наличии продольного стационарного электрического поля в углеродных нанотрубках и узких плоских нанолентах уровни энергии образуют эквидистантный спектр

$$E_{1,k} = E_1 + \varepsilon_k, \quad \varepsilon_k = [\pi \hbar v_F / (2L_0)](1 + 2k), \quad (24)$$

где, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$, $v_F = 3b|\tau|/(2\hbar)$ — скорость Ферми, $\tau = -|\tau|$, τ — интеграл перескока, $\hbar$ — постоянная Планка, L_0 — длина наноленты. При $L_0 = 50$ нм разность между соседними эквидистантными уровнями энергий $\Delta\varepsilon = \varepsilon_k - \varepsilon_{k-1}$ из

$$(24) \text{ равна } \Delta\varepsilon = \frac{\pi \hbar v_F}{L_0} \approx 2 \times 10^{-2} \text{ эВ. Такие результаты}$$

следуют, когда используются не Шредингеровские, т.е. используется уравнение Дирака (Майорана). В этом случае эволюция изоспина описывается уравнением Эрмита [38], в то время как в соответствии с (16) эволюция носителей заряда описывается с помощью функций Эйри (17). Данный вопрос выходит за рамки рассматриваемой работы.

Полученные в работе результаты представляют большой интерес при движении носителей заряда в нанотрубках по геликоидальным траекториям. Например, в работе [23] исследовано образование спинных минищелей за счет деформации кручения нехиральных гексагональных кресельных (n, n) и зигзагообразных ($n, 0$) кремниевых нанотрубок (SiNT). В работе снятие вырождения по спине в нанотрубках (эффект Рашбы) достигается за счет спин-орбитального взаимодействия.

Авторы статьи благодарят Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ за поддержку, оказанную в рамках Программы повышения конкурентоспособности “Проект 5-100” (договор № 02.а03.21.0005.27.08.2013).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Jensen H., Koppe H.* // Ann. Phys. 1971. V. 63. № 2. P. 586.
[https://doi.org/10.1016/0003-4916\(71\)90031-5](https://doi.org/10.1016/0003-4916(71)90031-5)
2. *Costa R.C.T.* // Phys. Rev. A. 1981. V. 23. № 4. P. 1982.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.23.1982>
3. *Cantele G., Ninno D., Iadonisi G.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 3730.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.13730>
4. *Aoki H., Koshino M., Takeda D. et al.* // Ibid. 2001. V. 65. P. 035102.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.035102>
5. *Encinosa M., Mott L.* // Phys. Rev. A. 2003. V. 68. P. 014102.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.68.014102>
6. *Gravesen J., Willatzen M.* // Ibid. 2005. V. 72. P. 032108.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.032108>
7. *Marchi A., Reggiani S., Rudan M., Bertoni A.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. P. 035403.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.035403>
8. *Ведерников А.И., Чаплик А.В.* // ЖЭТФ. 2000. Т. 117. № 2. С. 449. <http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/r/index/r/117/2/p449?a=list>
9. *Ortiz C., van den Brink J.* // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 165419.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.165419>
10. *Садьков Н.Р., Юдина Н.В.* // Журн. техн. физики. 2020. Т. 90. Вып. 3. С. 387.
<https://doi.org/10.21883/JTF.2020.03.48921.62-19>
11. *Atanasov V., Saxena A.* // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. P. 035440.
<https://doi.org/journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.92.035440>
12. *Mohanty N., Moore D., Xu Z. et al.* // Nat. Commun. 2012. V. 3. P. 844.
<https://doi.org/10.1038/ncomms1834>
13. *Dandoloff R., Truong T.T.* // Phys. Lett. A. 2004. V. 325. P. 233.
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2004.03.050>
14. *Atanasov V., Dandoloff R., Saxena A.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 033404.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.033404>
15. *Burgess M., Jensen B.* // Phys. Rev. A. 1993. V. 48. P. 1861.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.48.1861>
16. *Atanasov V., Saxena A.* // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 205409.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.205409>
17. *Joglekar Y.N. and Saxena A.* // Ibid. 2009. V. 80. P. 153405-4.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.153405>
18. *Atanasov V., Saxena A.* // J. Phys. Condens. Matter. 2011. V. 23. P. 175301.
19. *Yang S.H.* // Appl. Phys. Lett. 2020. V. 116. P. 120502.
20. *Yang S.H., Naaman R., Paltiel Y., Parkin S.S.P.* // Nat. Rev. Phys. 2021. V. 3. P. 328.
21. *Michaeli K., Kantor-Uriel N., Naaman R., and Waldeck D.H.* // Chem. Soc. Rev. 2016. V. 45. P. 6478
22. *Naaman R. and Waldeck D.H.* // Annu. Rev. Phys. Chem. 2015. V. 66. P. 263.
23. *D'yachkova P.N. and D'yachkov E.P.* // Appl. Phys. Lett. 2022. V. 120. P. 173101.
<https://doi.org/10.1063/5.008690>
24. *Kiricsi I., Fudala A., Konya et al.* // Appl. Catal. 2000. A. 203. L. 1.
25. *De Crescenzi M., Castrucci P., Scarselli M. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2005. V. 86. P. 231901.
26. *Morata A., Pacios M., Gadea G. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9. P. 4759.
27. *Wu H., Chan G., and Choi J.W.* // Nat. Nanotechnol. 2012. V. 7. P. 310.
28. *Chan C.K., Peng H., Liu G. et al.* // Ibid. 2008. V. 3. P. 31.
29. *Sadykov N.R., Muratov E.T., Pilipenko I.A., Aporoski A.V.* // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2020. V. 120. P. 114071.
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114071>
30. *Dubrovina B.A., Novikov S.P., and Fomenko A.T.* // Modern Geometry: Methods and Applications, 2nd ed. M.: Fizmatlit, 1986.
31. *Spivak M.* A Comprehensive Introduction to Differential Geometry Publish or Perish, Boston, 1999.
32. *Sadykov N.R.* Quantum Electronics. 1996. V. 26 (3). P. 271. <http://iopscience.iop.org/1063-7818/26/3/A24>.
33. *Будак Б.М., Самарский А.А., Тихонов А.Н.* Сборник задач по математической физике. 4-е изд., испр. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 688 с. ISBN 5-9221-0311-3.
34. *Onipko A. and Malysheva L.* // Phys. Status Solidi. 2017. V. 255. P. 1700248.
<https://doi.org/10.1002/pssb.201700248>
35. *Boyd R.W.* Nonlinear Optics. Academic Press, San Diego (2003).
36. *Landau L.D., Lifshitz E.M.* Course of Theoretical Physics. V. 3: Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, 4th ed. (Oxford Univ. Press, Oxford, 1980) M.: Nauka, 1989.
37. *Никифоров А.Ф., Уваров В.Б.* Специальные функции математической физики. М.: Физматлит, 1978.
38. *Садьков Н.Р.* // Теоретическая и математическая физика. 2014. Вып. 180. № 3. С. 368.
<https://doi.org/10.4213/tmf8642>