рация носителей тока для образца, отжигавшегося при 1800 K, оказалась в 3 раза выше, чем для более графитизированного образца, отжигавшегося при 2140 K [20–22]. Этот результат согласуется с тем фактом, что в каркасных углеродных структурах концентрация носителей возрастает при наличии дефектов.

## 7. Заключение

Анализ аномальной части магнитной восприимчивости $\delta\chi(T)$ при температуре ниже 50 K позволил оценить константу электрон-электронного взаимодействия $\lambda_c$ в электродуговых многослойных углеродных нанотрубках ($\lambda_c \sim 0{,}2$) и в графите ($\lambda_c \sim 0{,}1$). Установлено, что изменение концентрации носителей тока бромированием электродуговых MWNT не влияет на $\lambda_c$. Анализ аномальной части электропроводности и ОМС указывает на доминирование вкладов эффектов локализации в электропроводность и ОМС.

В беспримесных каталитических MWNT обнаружено отрицательное магнетосопротивление, связанное только с эффектами взаимодействия, что указывает на наличие положительного знака $\lambda_c$ в этих нанотрубках.

В пленках, состоящих из наноразмерных кристаллитов графита, обнаружены квазидвумерные квантовые поправки к электропроводности и ОМС — это полностью согласуется с тем, что толщина кристаллитов $h$ меньше $L_\varphi$ и $L_{\text{вз}}$ ($h \sim 15-150$ Å). В макроскопических кристаллах графита обнаружены трехмерные квантовые поправки к электропроводности и ОМС, поскольку в таких кристаллах всегда $h$ больше $L_\varphi$ и $L_{\text{вз}}$.

В углероде луковичной структуры обнаружена прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка и немонотонное изменение электропроводности по мере графитизации наноалмаза. Образцы с промежуточной температурой отжига (1900 K) имеют минимальную проводимость и одномерную прыжковую проводимость. В двух других образцах с температурами отжига 1800 и 2140 K обнаружена двумерная прыжковая проводимость и ОМС. Оценка концентрации носителей тока из данных по ОМС дает максимальное значение для наиболее дефектного образца на начальной стадии графитизации ($T_{\text{отж}} = 1800$ K).

Таким образом, анализ температурных и полевых зависимостей магнитной восприимчивости, магнетосопротивления и электропроводности неоднородных систем позволяет оценивать константу электрон-электронного взаимодействия $\lambda_c$ и определять эффективную размерность движения носителей тока. Искривление графеновых слоев в каркасных углеродных наноструктурах ведет к изменению $\lambda_c$.

Работа была поддержана грантами РФФИ № 03-02-16458 и 05-03-32901, междисциплинарной программой "Интеграция" СО РАН (грант № 113), Программой "Развитие научного потенциала высшей школы" (грант № 8234), программой "Университеты России" (УР.01.01.186), совместным грантом CRDF и Министерства образования РФ (№ 008-X1).

## Список литературы

1. Kociak M et al. *Phys. Rev. Lett.* **86** 2416 (2001)
2. Tang Z K et al. *Synthetic Met.* **133–134** 689 (2003)
3. Kopelevich Y et al. *Physica C* **408–410** 77 (2004)
4. Kuznetsov V L et al. *Chem. Phys. Lett.* **336** 397 (2004)
5. Kawabata A *Solid State Commun.* **34** 431 (1980)
6. Lee P A, Ramakrishnan T V *Rev. Mod. Phys.* **57** 287 (1985)
7. Альтшулер Б Л, Аронов А Г, Зюзин А Ю *ЖЭТФ* **84** 1525 (1983)
8. Okotrub A V et al. *Appl. Phys. A* **72** 481 (2001)
9. Романенко А И и др. *ФТТ* **44** 634 (2002)
10. Kotosonov A S, Kuvshinnikov S V *Phys. Lett. A* **230** 377 (1997)
11. Romanenko A I et al. *Solid State Commun.* **121** 149 (2002)
12. Romanenko A I et al. *Physica C* **388–389** 622 (2003)
13. Кудашов А Г и др. *ФТТ* **44** 626 (2002)
14. Couteau E et al. *Chem. Phys. Lett.* **378** 9 (2003)
15. Kudashov A G et al. *Fullerenes Nanotubes Carbon Nanostruct.* **12** 93 (2004)
16. Romanenko A I et al., in *The Progresses in Function Materials: 11th APAM Conf. Proc., Ningbo, P. R. China, 2004*, p. 59
17. Золотухин А А и др. *ЖЭТФ* **124** 1291 (2003)
18. Mott N F, Davis E A *Electronic Processes in Non-crystalline Materials* 2nd ed. (Oxford: Clarendon Press, 1979)
19. Демишев С В и др. *Письма в ЖЭТФ* **78** 984 (2003)
20. Романенко А И и др. *ФТТ* **44** 468 (2002)
21. Romanenko A I et al., in *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **703** 259 (2002)
22. Okotrub A V et al., in *Electronic Properties of Molecular Nanostructures* (AIP Conf. Proc., Vol. 591, Eds H Kuzmany et al.) (Melville, NY: AIP, 2001) p. 349
23. Альтшулер Б Л, Аронов А Г, Хмельницкий Д Е *Письма в ЖЭТФ* **36** 157 (1982)

PACS numbers: 03.65.Ge, 03.65.Nk, **73.63.–b**

# Обобщенный адиабатический принцип для описания динамики электрона в искривленных наноструктурах

В.В. Белов, С.Ю. Доброхотов, В.П. Маслов, Т.Я. Тудоровский

## 1. Введение

Прогресс в нанотехнологии позволил создавать тонкие протяженные квазиодномерные и квазидвумерные структуры сложной геометрии — нанотрубки и нанопленки. В рассматриваемой нами модели указанные структуры представляют собой области типа тонкого изогнутого цилиндра с "закрученной границей" или тонкой искривленной пленки. Вне этих областей волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ квантовой частицы экспоненциально быстро убывает (модель мягких стенок) либо равняется нулю (модель жестких стенок). Как и в работах [1, 2], мы полагаем, что (трехмерная) квантовая динамика электрона в наноструктурах, помещенных в электромагнитное поле, описывается так называемым гамильтонианом Рашбы:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \frac{\widehat{\mathbf{P}}^2}{2m} + v_{\text{int}}(\mathbf{r}) + v_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) - \frac{e\hbar}{2mc}\,\langle \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H} \rangle + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{so}}\,. \qquad (1)$$

Здесь $\mathbf{r}$ – радиус-вектор точки в трехмерном пространстве; $\widehat{\mathbf{P}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla - (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$; $e$ — заряд электрона; $m$ — эффективная масса квазичастицы; $v_{\text{int}}(\mathbf{r})$ — потенциал конфайнмента; $v_{\text{ext}}, \mathbf{A}$ — потенциалы внешних полей; $\mathbf{H}(t) = \operatorname{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ — однородное магнитное поле; $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ — матрицы Паули; $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{so}} = \alpha\langle \boldsymbol{\sigma}, [\nabla v_{\text{int}}, \widehat{\mathbf{P}}]\rangle$ — оператор взаимодействия спина электрона с электрическим полем кристалла, постоянная $\alpha$ зависит от типа рассматриваемого кристалла [3]. В случае $v_{\text{int}}(\mathbf{r}) = 0$ и равенства волновой функции нулю на границах трубок или пленок, получаются модели "пустых структур". Характерную толщину трубки и пленки мы обозначаем как $d$, а их характерные продольные размеры (например длину трубки) — как $l_0$. Разномасштабность в тонких протяженных наноструктурах удобно характеризовать малым "адиабатическим" параметром $\mu = d/l_0 \ll 1$. Мы ограничимся случаем достаточно слабого магнитного поля, считая, что ларморова частота $\omega_H = e|\mathbf{H}|/(mc) \sim \sim \hbar/(mdl_0)$ и магнитная длина $l_H \sim \sqrt{dl_0}$.

Квантовые состояния электрона $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (в том числе стационарные) удовлетворяют нестационарному уравнению Шрёдингера

$$\mathrm{i}\hbar\Psi_t = \widehat{\mathcal{H}}\Psi\,. \tag{2}$$

Мы ограничимся рассмотрением квантовой частицы (электрона) в таких трубках и пленках с медленно меняющимися геометрическими характеристиками, в которых малые сегменты с продольными масштабами порядка толщины $d$ с большой точностью можно считать соответственно прямым цилиндром и ровным слоем. Понятно, что эффективная динамика электрона в таких структурах должна быть одно- и двумерной и определяться уравнением с эффективным гамильтонианом $\hat{L}^{\nu}$ на оси трубки или на поверхности пленки для волновой функции $\psi^{\nu}$:

$$\mathrm{i}\hbar\psi_t^{\nu} = \hat{L}^{\nu}\psi^{\nu}\,, \tag{3}$$

где $\nu$ — номер "подзоны размерного квантования". Для перехода от (2) к (3) мы используем схему, согласно которой для нижних подзон $\nu \ll \mu^{-1}$ функция $\Psi$ восстанавливается по $\psi^{\nu}$ в результате действия на $\psi^{\nu}$ "сплетающего" оператора (см. раздел 3.1). В стационарных задачах производная $\mathrm{i}\hbar\partial/\partial t$ заменяется энергией $E$.

Различные характерные размеры и наличие свободных носителей дают возможность рассматривать наноструктуры в качестве квантовых волноводов или квантовых систем с ограничениями [6–15]. Подобные задачи, связанные с волноводами, возникают в электродинамике, акустике, теории упругости, физике океана и т.д. Исключение ограничений, приводящее к понижению размерности задачи, обычно проводится с помощью адиабатического приближения, которое эквивалентно асимптотическому разделению колебаний на продольные и поперечные моды. Для уравнения Гельмгольца такое разделение было проделано в [16], где выписано уравнение типа (3) для продольной моды и показано, что, подбирая кривизну волновода, можно создать резонаторы с одномодовыми связанными состояниями [17]. В дальнейшем в квантово-механических задачах аналогичные уравнения были выведены в работах [1, 2, 7–15]. Заметим, что задачи о волноводах схожи с задачами физики молекул, при этом роль потенциала конфайнмента играет кулоновский потенциал с "замороженными" координатами тяжелых ядер. В математической литературе уравнения, возникающие в разномасштабных задачах, называют уравнениями с операторнозначным символом [19].

Волновые функции продольных состояний $\psi^{\nu}$ могут быть: 1) делокализованными и существенно изменяющимися на масштабах порядка $l_0$; 2) делокализованными и быстроосциллирующими, т.е. изменяющимися на масштабах $\lambda_{\parallel} \ll l_0$; 3) асимптотически локализованными на малых участках с масштабами $\ll l_0$. Скорость изменения волновой функции мы характеризуем "квазиклассическим" параметром $h = \lambda_{\parallel}/l_0$, где $\lambda_{\parallel} = \max|\partial\psi^{\nu}/\partial x|^{-1}$ — характерная для $\psi^{\nu}$ длина волны. Окончательные формулы для $\Psi$ существенно зависят от соотношений между $\lambda_{\parallel}$, $d$ и $l_0$ или, что эквивалентно, от соотношения между параметрами $\mu$ и $h$.

В этом докладе мы приводим эффективные уравнения "на подзонах размерного квантования" (3), аккуратно выведенные и пригодные для описания всех перечисленных продольных состояний. Класс этих состояний оказывается существенно шире, чем в работах [7–11]. Из полученных уравнений следуют появление связанных состояний и ловушек за счет переменной толщины трубки, влияние спина на классическую одномерную динамику в трубках в присутствии магнитного поля (см. раздел 4), возможность переворота спина в искривленных трубках и т.д.

Мы ограничиваемся здесь примером нанотрубок. Результаты авторов доклада, относящиеся к нанопленкам и оптическим планарным волноводам, приведены в [15, 17]. Нанопленкам также посвящены работы [18, 19].

## 2. Эффективный гамильтониан на подзоне размерного квантования в нанотрубке

### 2.1. Формулы для гамильтониана на $\nu$-й подзоне в изогнутой трубке

Определим подходящую систему координат в окрестности оси трубки. Будем считать, что ось трубки — кривая $\gamma$ — задана уравнением $\mathbf{r} = \mathbf{R}(x)$, $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$, $x \in \mathbb{R}$, где $\mathbf{R}(x)$ — гладкая вектор-функция, $x$ — натуральный параметр на $\gamma$, т.е. длина трубки, отсчитанная от некоторой фиксированной точки $x^*$, $|\partial_x\mathbf{R}(x)| = 1$, $\partial_x = \partial/\partial x$. В случае, когда кривизна оси $k(x) = |\partial_x^2\mathbf{R}| \neq 0$, определен трехгранник Френе $\{\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{n} = \partial_x^2\mathbf{R}/|\partial_x^2\mathbf{R}|, \mathbf{b} = [\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{n}]\}$ и кручение оси $\varkappa(x)$: $\partial_x\mathbf{n} = -\varkappa\mathbf{b} - k\partial_x\mathbf{R}$, $\partial_x\mathbf{b} = \varkappa\mathbf{n}$. Поворачивая $\mathbf{n}(x)$, $\mathbf{b}(x)$ на угол $\theta(x) = \int_{x^*}^{x}\varkappa(x)\,\mathrm{d}x$, построим векторы $\mathbf{n}_1(x)$, $\mathbf{n}_2(x)$. Тогда введенные соотношением $\mathbf{r} = \mathbf{R}(x) + \mathbf{y}(x, y_1, y_2)$, $\mathbf{y}(x, y_1, y_2) = y_1\mathbf{n}_1(x) + y_2\mathbf{n}_2(x)$ криволинейные координаты $(x, y_1, y_2)$ в окрестности оси трубки будут ортогональны.

Будем понимать под периодическими трубками замкнутые трубки или трубки, на концах которых для функции $\Psi$ выполнено условие периодичности Борна–Кармана. Период трубки будем обозначать $l_0$. При прохождении $l_0$ векторы $\mathbf{n}_1(x)$, $\mathbf{n}_2(x)$ переходят в $\Pi(\theta_0)\,\mathbf{n}_1(x)$, $\Pi(\theta_0)\mathbf{n}_2(x)$, где $\Pi(\theta_0)$ — матрица поворота на угол $\theta_0 = \int_{x^*}^{x^*+l_0}\varkappa(x)\,\mathrm{d}x$. В силу этого координаты $(x, y_1, y_2)$ не являются глобальными — одной и той же точке в трехмерном пространстве соответствуют координаты $\bigl(x + nl_0,\, \Pi(-n\theta_0)\,y\bigr)$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, где $y = \{y_1, y_2\}^{\mathrm{T}}$ — вектор-столбец из двух компонент, и условие периодичности имеет вид $\Psi(x, y) = \Psi\bigl(x + l_0, \Pi(-\theta_0)\,y\bigr)$.

Для упрощения формул в дальнейшем ограничимся классом модельных потенциалов вида $v_{\mathrm{int}} = v_{\mathrm{int}}(x^*, D(x)^{-1}\Pi(\Phi)^{-1}\mathbf{y})$, где $D(x) > 0$, $v_{\mathrm{int}}(x^*, y_1, y_2)$ — гладкая функция, $\Pi(\Phi)$ — матрица поворота на угол "внутреннего" кручения $\Phi(x)$, $x^*$ — некоторая фиксированная точка на оси трубки.

Для применения адиабатического приближения следует определить "мгновенные поперечные" функции. Они имеют вид $\exp(\mathrm{i}\langle\mathbf{y}, \mathbf{A}(\mathbf{R})\rangle)\,w_j^{\nu}$, $j = 1, \ldots, r$, где $w_j^{\nu}$ —

нормированные по $y$ на 1 собственные функции задачи

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)+v_{\mathrm{int}}(x,y)\right] w_j^{\nu}=\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)\, w_j^{\nu}\,. \tag{4}$$

Наличие номера $j$ у функций $w_j^{\nu}$ связано с тем, что значение $\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)$ может быть вырожденным; мы предполагаем, что *кратность вырождения r не зависит от продольной координаты x*. Функции $w_j^{\nu}(x,y)$ и $\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)$ выражаются через $w_j^{\nu}(x^*,y)$, $\varepsilon_{\perp}(x^*)$:

$$w_j^{\nu}(x,y)=D^{-1}(x)\,w_j^{\nu}\left(x^*,D^{-1}(x)\,\Pi^{-1}(x)\,y\right)\times$$
$$\times\exp\left[\mathrm{i}\beta_j(x-x^*)\right],$$
$$\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)=\frac{\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x^*)\,D^2(x^*)}{D^2(x)}\,.$$

Для непериодической трубки $w_j^{\nu}(x^*,y)$ и $\beta_j$ выбираются неоднозначно; $\beta_j$ можно положить равными нулю. Для периодической трубки целесообразно выбрать $\beta_j$ таким образом, чтобы $w_j^{\nu}(x+l_0,\,\Pi(-\theta_0)\,y)=w_j^{\nu}(x,y)$. Тогда одномерный по $x$ эффективный квантовый матричный гамильтониан определяется как

$$\hat L^{\nu}=\frac{\hat p^2}{2m}+v_{\mathrm{ext}}(x)+\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)-\frac{\hbar^2k^2(x)}{8m}+$$
$$+\frac{e}{c}\int_0^x\left\langle\partial_x\mathbf{R}(x'),\,\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{R}(x'),t)}{\partial t}\right\rangle \mathrm{d}x'+$$
$$+\hbar B\otimes E_2\,\frac{\hat p}{m}+\hat L_y\otimes E_2-\frac{e\hbar}{2mc}\,E_r\otimes\langle\boldsymbol{\sigma},\mathbf{H}\rangle+\hat L_{\mathrm{s}y}, \tag{5}$$

где $\hat p=-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x$,

$$\hat L_y=\Lambda\left(\frac{\hbar}{m}\,(\partial_x\Phi)\,\hat p-\frac{e}{2mc}\langle\partial_x\mathbf{R},\mathbf{H}\rangle\right)-\frac{e}{mc}\langle\mathbf{Y}_{\perp},\mathbf{H}\rangle\,\hat p+$$
$$+\left\langle\mathbf{Y},\nabla v_{\mathrm{ext}}+\frac{e}{c}\,\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{R},t)}{\partial t}+k\mathbf{n}\,\frac{\hat p^2}{2m}\right\rangle,$$

$$\hat L_{\mathrm{s}y}=\alpha\big(M^0\otimes\langle\boldsymbol{\sigma},\partial_x\mathbf{R}\rangle+M^1\otimes\langle\boldsymbol{\sigma},\mathbf{n}_1\rangle\,\hat p+$$
$$+M^2\otimes\langle\boldsymbol{\sigma},\mathbf{n}_2\rangle\,\hat p\big)\,.$$

Здесь введены следующие обозначения: $E_n$ — единичная $n\times n$-матрица; $B$ — диагональная $r\times r$-матрица с коэффициентами $B_{jj'}=\beta_j\delta_{jj'}$; $\Lambda(x)$ — $r\times r$-матрица момента с элементами $\Lambda_{jj'}=\langle w_j^{\nu},\hat l w_{j'}^{\nu}\rangle_y$, $\hat l=-\mathrm{i}\hbar(y_1\partial/\partial y_2-y_2\partial/\partial y_1)$; $M^k(x)$ — матрицы размером $r\times r$ $(k=0,1,2)$ вида

$$(M^0)_{jj'}=-\mathrm{i}\hbar\Big\langle w_j^{\nu},\big((\partial_1v_{\mathrm{int}})\,\partial_2-(\partial_2v_{\mathrm{int}})\,\partial_1\big)\,w_{j'}^{\nu}\Big\rangle_y\,,$$

$$(M^1)_{jj'}=\langle w_j^{\nu},(\partial_2v_{\mathrm{int}})\,w_{j'}^{\nu}\rangle_y\,,$$

$$(M^2)_{jj'}=-\langle w_j^{\nu},(\partial_1v_{\mathrm{int}})\,w_{j'}^{\nu}\rangle_y\,;$$

$\partial_i=\partial/\partial y_i$; $\otimes$ — оператор тензорного произведения матриц; $\mathbf{Y}(x)=Y_1\mathbf{n}_1+Y_2\mathbf{n}_2$, $\mathbf{Y}_{\perp}(x)=Y_2\mathbf{n}_1-Y_1\mathbf{n}_2$ — трехмерные "векторы", компоненты которых суть "дипольные" $2\times2$-матрицы $(Y_i)_{jj'}(x)=\langle w_j^{\nu},y_i\,w_{j'}^{\nu}\rangle_y$, $i=1,2$; $\langle\cdot,\cdot\rangle_y$ обозначает интегрирование по переменным $y$.

Для случая $\lambda_{\parallel}\gg d$ гамильтониан типа (5) был получен в [1, 2]. "Геометрический потенциал" $-\hbar^2k(x)^2/(8m)$, впервые введенный в [16], необходимо принимать во внимание в длинноволновом случае ($\lambda_{\parallel}\sim l_0$). Именно этот потенциал порождает связанные состояния в пустом волноводе [16], создавая эффективное притяжение к точкам наибольшей кривизны оси.

Если $\psi^{\nu}$ есть решение эффективного уравнения (3), то функция $\Psi^{\nu}$ восстанавливается по формуле

$$\Psi^{\nu}(x,y,t)\approx G(x,y)^{-1/4}\big(\chi_0^{\nu}(x,y,t)+\hat\chi_1^{\nu}\big)\times$$
$$\times\exp\left(\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int_{x^*}^x\langle\partial_x\mathbf{R},\mathbf{A}(\mathbf{R})\rangle\,\mathrm{d}x\right)\psi^{\nu}(x,t)\,,$$

где $G(x,y)=(1-k\langle\mathbf{y},\mathbf{n}\rangle)^2$,

$$\chi_0^{\nu}=\exp\Big(\mathrm{i}\big\langle\mathbf{y},\mathbf{A}(\mathbf{R})\big\rangle\Big)\times$$
$$\times\left\|\begin{matrix} w_1^{\nu}(x,y) & 0 & \cdots & w_{\nu+1}^{\nu}(x,y) & 0\\ 0 & w_1^{\nu}(x,y) & \cdots & 0 & w_{\nu+1}^{\nu}(x,y)\end{matrix}\right\|, \tag{6}$$

$\hat\chi_1^{\nu}=\chi_0^{\nu}(x,\hat p,y,t)$— определяющий поправку дифференциальный оператор, явный вид которого для дальнейшего несуществен.

### 2.2. Геометрические фазы и граничные условия.

В незамкнутой трубке для уравнений (3) естественно рассматривать задачу рассеяния и задачу об эволюции волновых пакетов. В периодической трубке условие для $\Psi$ влечет за собой блоховское условие для вектор-функции $\psi^{\nu}$:

$$\psi^{\nu}(x+l_0,t)=\exp\left(\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int_0^{l_0}\langle\partial_x\mathbf{R},\mathbf{A}(\mathbf{R})\rangle\,\mathrm{d}x\right)\psi^{\nu}(x,t)\,.$$

Для замкнутой трубки фаза

$$\frac{e}{\hbar c}\int_0^{l_0}\langle\partial_x\mathbf{R},\mathbf{A}(\mathbf{R})\rangle\,\mathrm{d}x=\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}\,,$$

где $\Phi$ — поток магнитного поля через область, охватываемую осью трубки,

$$\Phi=\int_0^{l_0}\langle\partial_x\mathbf{R},\mathbf{A}(\mathbf{R})\rangle\,\mathrm{d}x\,,$$

$\Phi_0=2\pi\hbar c/e$ — квант магнитного потока. Такое равенство есть проявление *эффекта Ааронова–Бома* [20].

## 3. Обобщенный адиабатический принцип

### 3.1. "Операторное" разделение переменных

Изложим основные идеи "обобщенного адиабатического принципа", приводящего к уравнениям (3), (5). Волновые функции $\Psi=\Psi^{\nu}(x,y,t)$ на нижних подзонах поперечного квантования представляются в виде действия зависящего от $x,\hat p=-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x,t,y$ "сплетающего" оператора $\hat\chi^{\nu}=\chi^{\nu}(x,\hat p,y,t)$ на не зависящую от $y$ функцию $\psi^{\nu}(x,t)$:

$$\Psi^{\nu}(x,y,t)=\chi^{\nu}(x,\hat p,y,t)\,\psi^{\nu}(x,t)\,. \tag{7}$$

Поскольку операторы $x$ и $\hat p$ не коммутируют, то следует договориться о способе упорядочения действия этих операторов. Для определенности считаем, что оператор

$\hat{p}$ действует первым, а оператор $x$ — вторым (см. [22, 23]). К формуле (7) добавляется требование, чтобы $\psi^{\nu}$ удовлетворяла уравнению (3). Как и в задачах на собственные функции и собственные значения, операторы $\hat{\chi}^{\nu}$ и $\hat{L}^{\nu}$ определяются одновременно. Вычисление оператора $\hat{L}^{\nu}$ обобщает *подстановку Пайерлса* и *квантование дисперсионного соотношения* (ср. [24]). Учитывая возможное вырождение $\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)$ в задаче (4), под $\psi^{\nu}(x,t)$ следует понимать $2r$-мерную вектор-функцию, а под $\hat{\chi}^{\nu}$ — $2\times 2r$-матричную функцию от операторов $\hat{p}$, $x$.

Представление (7) для $\Psi^{\nu}$ является естественным обобщением метода Борна–Оппенгеймера, в котором функция $\chi^{\nu}$ не зависит от $\hat{p}$, и формул [21] для ВКБ-функций $\psi^{\nu}$ (ВКБ — Вентцель–Крамерс–Бриллюэн), включая ситуации с точками поворота и фокусировкой. Формула (7) является реализацией идеи квантового осреднения [23–26]: некоторый блок диагонализующего оператора $\hat{U}$ асимптотически (по параметру $\mu$) представляется в виде $\hat{U}=\exp(\mathrm{i}\hat{S})\approx\sum_{\nu}|\hat{\chi}^{\nu}\rangle\langle\hat{\chi}^{\nu}|$, $\langle\hat{a}\,|\,\hat{b}\rangle = \int \mathrm{d}y\,(\hat{a}^{+}\hat{b})$, $\langle\hat{\chi}^{\nu}|\hat{\chi}^{\nu'}\rangle=\delta_{\nu\nu'}$. После "подкрутки" уравнение (2) принимает вид

$$\hat{U}^{-1}\left(-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}+\hat{\mathcal{H}}\right)\hat{U}=\sum_{\nu}|\hat{\chi}^{\nu}\rangle\left(-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}+\hat{L}^{\nu}\right)\langle\hat{\chi}^{\nu}|=0\,.$$

Для функции $\Psi^{\nu}=\hat{\chi}^{\nu}\psi^{\nu}$ получаем уравнение

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}+\hat{\mathcal{H}}\right)\Psi^{\nu}=|\hat{\chi}^{\nu}\rangle\left(-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}+\hat{L}^{\nu}\right)\psi^{\nu}=0\,,$$

эквивалентное (3).

Представление $\hat{\chi}^{\nu}$ в виде функции от операторов $x$, $\hat{p}$ является принципиальным. В математической литературе функция от $x$, $\hat{p}$ называется *псевдодифференциальным оператором*, а задающая его функция — *символом*. Переход от операторов $\hat{\chi}^{\nu}$ и $\hat{L}^{\nu}$ к символам $\chi^{\nu}$ и $L^{\nu}$ дает возможность не беспокоиться о некоммутативности операторов $x$ и $\hat{p}$. Как правило, точно вычислить $\chi^{\nu}$ и $L^{\nu}$ не удается, и речь может идти только о вычислении коэффициентов асимптотического разложения $\chi^{\nu}$ и $L^{\nu}$ по адиабатическому параметру $\mu$:

$$\chi^{\nu}=\chi_0^{\nu}(x,p,y)+\chi_1^{\nu}(x,p,y)+\chi_2^{\nu}(x,p,y)+\ldots,\chi_j^{\nu}\sim\mu^{j}\,,$$

$$L^{\nu}=L_0^{\nu}(x,p)+L_1^{\nu}(x,p)+L_2^{\nu}(x,p)+\ldots,L_j^{\nu}\sim\frac{\mu^{j}\hbar^2}{md^2}\,.$$

Общие формулы для $\chi_k^{\nu}$ и $L_k^{\nu}$ приведены в [15], в том числе при наличии вырождения эффективного гамильтониана. Их нахождение требует привлечения нескольких элементарных понятий и формул операторного исчисления [22], которые доступны студентам 3-го или 4-го курсов физико-математических специальностей. С другой стороны, построение оператора "подкрутки" в квантовом осреднении зачастую представляет собой технически весьма сложную задачу. Поэтому реализация адиабатического приближения в виде (7) и (3), по нашему мнению, является его наиболее прагматичной и простой формой.

Для многих задач $\chi_j^{\nu}$ и $L_j^{\nu}$ — полиномы по $p$, следовательно, тогда $\hat{\chi}^{\nu}$ и $\hat{L}^{\nu}$ — дифференциальные операторы. Функция $\chi_0^{\nu}$ часто не зависит от импульса, в этом случае $\hat{\chi}_0^{\nu}$ — обычная функция переменных $x$, $y$. Но, как правило, $\chi_1^{\nu}$ зависит от $p$, что ограничивает возможность применения адиабатического приближения (см. раздел 3.3).

### 3.2. Перенормировка энергии и квазиклассические асимптотики

Спектр оператора (5) сильно зависит от характера изменения эффективного потенциала, т.е. от эффективной силы, действующей на частицу в направлении оси трубки.

Для примера рассмотрим трубку в отсутствие внешних полей. Тогда эффективный "продольный" потенциал (аналог потенциала Морза в молекулярной физике) в основном определяется "флуктуациями" размеров поперечного сечения и, следовательно, "мгновенной" поперечной энергии $\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)$. Рассмотрим периодическую трубку в следующих случаях: 1) $\varepsilon_{\perp}^{\nu}=\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)=\mathrm{const}$; 2) $\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x)$ имеет на периоде единственную точку минимума $x_0$. В случае 1) спектр оператора (5) имеет вид $E^{\nu n}=\varepsilon_{\perp}^{\nu}+\varepsilon_{\parallel}^{\nu n}$. На часть спектра $\varepsilon_{\parallel}^{\nu n}\ll\varepsilon_{\perp}^{\nu}$ может существенно влиять кривизна оси (например, организовывать связанные состояния [9, 16]) и слагаемые, связанные со спином [2]. В случае 2) точка минимума $x_0$ порождает спектральную серию асимптотически локализованных собственных функций ("ловушечных" состояний, аналогичных нижним состояниям ядер в молекулярной физике) и собственных значений $E^{\nu n}=\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)+\varepsilon_{\parallel}^{\nu n}$, при этом геометрический потенциал практически не играет никакой роли и может быть учтен с помощью теории возмущений. Продольная длина волны $\lambda_{\parallel}$ связана с $\varepsilon_{\parallel}^{\nu n}$ соотношением $\varepsilon_{\parallel}^{\nu n}\sim\hbar^2/(2m\lambda_{\parallel}^2)$.

Разумно предложить следующую классификацию собственных значений оператора (5) в зависимости от соотношения между $\varepsilon_{\parallel}^{\nu n}$ и $\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)$:

а) длинноволновые состояния,

$$\lambda_{\parallel}\sim l_0\,,\quad \varepsilon_{\parallel}^{\nu n}\sim\frac{d^2}{l_0^2}\,\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)\,,\quad h\sim 1\,;$$

б) средневолновые,

$$\lambda_{\parallel}\sim\sqrt{dl_0}\,,\quad \varepsilon_{\parallel}^{\nu n}\sim\frac{d}{l_0}\,\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)\,,\quad h\sim\sqrt{\mu}\,;$$

в) коротковолновые,

$$\lambda_{\parallel}\sim d\,,\quad \varepsilon_{\parallel}^{\nu n}\sim\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)\,,\quad h\sim\mu\,;$$

г) ультракоротковолновые,

$$\lambda_{\parallel}\sim\frac{d^{3/2}}{l_0^{1/2}}\,,\quad \varepsilon_{\parallel}^{\nu n}\sim\frac{l_0}{d}\,\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)\,,\quad h\sim\mu^{3/2}\,.$$

При продольной длине волны

$$\lambda_{\parallel}\sim\frac{d^2}{l_0}\,,\quad \varepsilon_{\parallel}^{\nu n}\sim\frac{l_0^2}{d^2}\,\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x_0)\,,\quad h\sim\mu^{2}$$

адиабатическое приближение разрушается. Близкая классификация для абстрактной задачи была проведена в [27]. В случае а) уравнение (3) следует решать точно; в случаях б)–г) можно применять квазиклассическое приближение, при этом в случае б) спин может влиять на классическую динамику; в случае г) квазиклассическое приближение совпадает с борновским (см. примеры в разделе 4).

### 3.3. О точности вывода уравнений на подзонах размерного квантования

С помощью асимптотической процедуры [15] оператор (5) можно построить с любой заданной точностью. Однако его вычисление связано с определенными техническими трудностями. В случае, когда $\hat{\mathcal{H}}$ не зависит от времени, разумно строить оператор $\hat{L}^{\nu}$ с такой точностью, при которой его спектр $E^{\nu n}$ является приближением спектра $\varepsilon^{\nu n}$ оператора $\hat{\mathcal{H}}$. Для этого требуется выполнение условия $|E^{\nu n} - \varepsilon^{\nu n}| \ll |E^{\nu n} - E^{\nu(n+1)}|$. Как правило, можно ограничиться тремя членами разложения оператора $\hat{L}^{\nu}$. Для построения возбужденных собственных функций оператора (5) достаточно двух первых членов.

В случае г) (см. раздел 3.2) характерный период поперечных колебаний $md^2/\hbar$ становится сравнимым со временем прохождения частицей трубки $m\lambda_{\|} l_0/\hbar$, поэтому мгновенное разделение на продольные и поперечные колебания тогда не имеет смысла и адиабатическое приближение перестает работать. При этом в формуле (7) результат действия оператора $\hat{\chi}_1^{\nu}$ на функцию $\psi^{\nu}$ нельзя считать "поправкой", поскольку $\hat{\chi}_1^{\nu}\psi^{\nu} \sim 1$. Отвечающая таким состояниям часть спектра оператора $\hat{L}^{\nu}$ не является приближением ни для каких собственных значений $\hat{\mathcal{H}}$. Такую ситуацию удается иногда проанализировать с помощью комплексного метода ВКБ [28]. Точность асимптотических конструкций в зависимости от соотношений между параметрами $\mu$ и $h$ проанализирована в [14, 15].

## 4. Некоторые свойства трубок с круглым сечением

В качестве потенциала конфайнмента выберем $v_{\text{int}} = m\Omega^2(x)(y_1^2 + y_2^2)/2$. Тогда $\varepsilon_{\perp}^{\nu}(x) = \Omega(x)(\nu+1)$, кратность вырождения задачи (4) равна $\nu+1$, и, следовательно, матричный гамильтониан $\hat{L}^{\nu}$ имеет размерность $2(\nu+1)\times 2(\nu+1)$. Выберем в качестве $w_j^{\nu}$ собственные функции оператора момента

$$\hat{l} = -\mathrm{i}\hbar\left(y_1\,\frac{\partial}{\partial y_2} - y_2\,\frac{\partial}{\partial y_1}\right) = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\,,$$

которые имеют вид $\exp(\mathrm{i}l\varphi)\,u^{|l|k}(r)$, где $l = 0, \pm 1, \ldots$; $k = 0, 1, \ldots$; $y_1 = r\cos\varphi$, $y_2 = r\sin\varphi$. В базисе $\{w_j^{\nu}\}$ гамильтониан $\hat{L}^{\nu}$ имеет вид блочно-диагональной матрицы с $2\times 2$-блоками $\hat{L}^{\nu l}$, отвечающими проекции момента на ось трубки, равную $l$:

$$\hat{L}^{\nu l} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hbar\Omega(x)\,(\nu+1) - \frac{\hbar^2 k^2}{8m} - \\ - \frac{\hbar e}{2mc}\,\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\rangle\, l - \frac{\hbar}{2}\big\langle\boldsymbol{\sigma}\,, \mathbf{a}^l(x)\big\rangle\,. \tag{8}$$

Здесь $\mathbf{a}^l(x) = e(mc)^{-1}\mathbf{H} - 2\alpha ml\Omega(x)^2\partial_x\mathbf{R}$, $k(x)$ — кривизна оси трубки в точке $x$. Таким образом, вектор $\psi^{\nu}(x,t)$ составлен из двухкомпонентных вектор-функций $\psi^{\nu l}(x,t)$, удовлетворяющих уравнениям $\mathrm{i}\hbar\psi_t^{\nu l} = \hat{L}^{\nu l}\psi^{\nu l}$. Приведем некоторые его точные и асимптотические решения.

### 4.1. Явно решаемая модель для спиральной трубки

Рассмотрим спиральную трубку с цилиндрически симметричным сечением и осью

$$\mathbf{R}(x) = \left(\rho_1\sin\frac{x}{\rho}\,, -\rho_1\cos\frac{x}{\rho}\,, \rho_2\,\frac{x}{\rho}\right), \quad \rho = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2}\,.$$

Для этой трубки кривизна оси $k(x) = \rho_1/\rho^2 = \text{const}$, кручение оси $\varkappa(x) = \rho_2/\rho^2 = \text{const}$.

В случае, когда сечение трубки постоянно, $\Omega(x) = \Omega = \text{const}$, и магнитное поле направлено вдоль оси спирали, $\mathbf{H} = (0, 0, H)$, гамильтониан (8) унитарно эквивалентен оператору с постоянными коэффициентами:

$$U^{-1}\hat{L}^{\nu l}U = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar}{2m\rho}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\left(-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\right) + \\ + \hbar\Omega(\nu+1) - \frac{l\rho_2}{2\rho}\,\hbar\omega_H + \frac{\hbar^2\rho_2^2}{8m\rho^4} - \\ - \frac{\hbar\omega_H}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} + \alpha m\Omega^2\,\frac{\hbar l}{\rho}\begin{pmatrix}\rho_2 & \rho_1\\ \rho_1 & -\rho_2\end{pmatrix},$$

$$U(x) = \begin{pmatrix}\exp\left[-\dfrac{\mathrm{i}x}{2\rho}\right] & 0\\ 0 & \exp\left[\dfrac{\mathrm{i}x}{2\rho}\right]\end{pmatrix},$$

где $\omega_H = eH/(mc)$ — ларморова частота. Поэтому спектр оператора $\hat{L}^{\nu l}$ (8) в бесконечной спиральной трубке непрерывен и имеет вид

$$E^{\nu l}(q) = \frac{q^2}{2m} + \hbar\Omega(\nu+1) - \frac{\rho_2\omega_H l}{2\rho} + \frac{\hbar^2\rho_2^2}{8m\rho^4} - \\ - \sigma_{\uparrow\downarrow}\,\frac{\hbar}{m\rho}\sqrt{\left(\frac{q + m\omega_H\rho}{2} - \alpha m^2\Omega^2 l\rho_2\right)^2 + \left(\alpha m^2\Omega^2 l\rho_1\right)^2}\,,$$

где $\sigma_{\uparrow\downarrow} = \pm 1$.

Пусть волновая функция $\Psi^{\nu}(x,y)$ периодически повторяется через каждые $N$ витков. Это условие приводит к блоховскому условию для функции $\psi^{\nu l}$ с квазиимпульсом $I/(2\pi\hbar\rho N)$, $I = -I_{\text{AB}} + I_{\text{B}}^l$, где

$$I_{\text{AB}} = \frac{e}{c}\int_0^{2\pi\rho N}\big\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{A}(\mathbf{R})\big\rangle\,\mathrm{d}x = \frac{e}{c}\,N\Phi\,,$$

$$I_{\text{B}}^l = \hbar l\int_0^{2\pi\rho N}\varkappa\,\mathrm{d}x\,.$$

Таким образом, условие периодичности $\Psi^{\nu}$ имеет вид:

$$N\left(\frac{2\pi\rho q^{ln}}{\hbar} - \pi - 2\pi\rho\varkappa l + \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}\right) = 2\pi n\,.$$

Отсюда следует, что спектр оператора $\hat{L}^{\nu l}$ с указанными блоховскими условиями дискретен: $E^{\nu ln} = E^{\nu l}(q^{ln})$, где

$$q^{ln} = \frac{\hbar}{\rho}\left(\frac{n}{N} + \frac{l\rho_2}{\rho} + \frac{1}{2}\right) - \frac{\Phi}{\rho\Phi_0}\,,$$

$\Phi = \pi\rho_1^2 H$ — поток магнитного поля через площадь проекции спирали. Слагаемое $I_{\text{AB}}$ есть проявление эффекта Ааронова – Бома, а $I_{\text{B}}^l$ — фазы Берри. Отметим, что $I_{\text{B}} = 0$ при $l = 0$. Из работы [14] следует, что в случае невырожденного терма $I_{\text{B}} = 0$ для произвольного сечения трубки. При $\rho_2 = 0$ $E^{\nu ln}$ определяют спектр замкнутой торической трубки.

В разделах 4.2 – 4.6 мы исследуем ситуации, в которых к уравнению (3) можно применить квазиклассическое приближение.

### 4.2. Динамика спина в коротковолновом режиме

Рассмотрим трубку переменной толщины с $\Omega(x) \neq \text{const}$ и нестационарное уравнение $\mathrm{i}\hbar\psi_t^{\nu l} = \hat{L}^{\nu l}\psi^{\nu l}$. Исследуем в "коротковолновом режиме" [14] эволюцию волновых пакетов $\psi^{vl}(x,t)$, заданных условием $\psi^{vl}(x,0) = \exp(\mathrm{i}S_0^v(x)/\hbar)\,A_0^{vl}(x)$, где $A^{vl}$ — двумерный вектор. В этом случае функции $\psi^{vl}$ имеют квазиклассический вид и восстанавливаются по:

1) траекториям $x = X(x_0, t)$ уравнения Ньютона

$$m\ddot{x} = -\hbar\Omega'(x)(v+1),\ x|_{t=0} = x_0\,,$$

$$m\dot{x}|_{t=0} = \frac{\partial S_0^v}{\partial x}\,(x_0)\,;$$

2) решениям $A^{vl}(x_0, t)$ уравнения для спинора $A^{vl}$:

$$\frac{\mathrm{d}A^{vl}}{\mathrm{d}t} - \frac{i}{2}\big\langle \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{a}^l\big(x(t)\big)\big\rangle A^{vl} = 0\,, \quad A^{vl}|_{t=0} = A_0^{vl}(x_0)\,. \quad (9)$$

Если при $t < t^*$ якобиан $J^{vl}(x_0,t) = |\partial X/\partial x_0| \neq 0$, то

$$\psi^{vl}(x,t) \approx \exp\left[\frac{\mathrm{i}S^v\big(x_0(x,t),t\big)}{\hbar} + \mathrm{i}\vartheta\big(x_0(x,t),t\big)\right]\times$$
$$\times \frac{A^{vl}\big(x_0(x,t),t\big)}{\sqrt{J^{vl}\big(x_0(x,t),t\big)}}\,,$$

где

$$S^v(x_0,t) = S_0^v(x_0) + \int_0^t \left[\frac{m}{2}\,\dot{X}(x_0,t)^2 - \right.$$
$$\left. - \hbar\Omega\big(X(x_0,t)\big)(v+1)\right]\mathrm{d}t\,,$$
$$\vartheta(x_0,t) = \frac{l}{2}\int_0^t \big\langle \partial_x \mathbf{R}\big(X(x_0,t)\big), \mathbf{H}\big\rangle\,\mathrm{d}t\,,$$

$x_0(x,t)$ — решение уравнения $X(x_0,t) = x$ относительно $x_0$. При $t > t^*$ после появления фокальных точек (например в местах сужения трубки и вблизи ее конца) асимптотика определяется с помощью канонического оператора [29].

### 4.3. Спектральные асимптотики в коротковолновом режиме

Пусть в трубке с переменной толщиной функции $\Psi^v$ удовлетворяют условию периодичности через каждый виток спирали и частота $\Omega(x)$ с тем же периодом имеет на витке единственную точку минимума $x_0$. Тогда функции, отвечающие энергии $E^{vln} < \max \varepsilon_\perp^v(x)$, локализованы в классически доступной области; функции, отвечающие $E^{vln} > \max\varepsilon_\perp^v(x)$, делокализованы и описывают "баллистические" состояния [30].

*Локализованные состояния* можно разделить на две группы:

1) низколежащие, соответствующие осцилляторному приближению (приближению Борна – Оппенгеймера для (2)) со спектром

$$E^{vnl} \approx \hbar\Omega(x_0)(v+1) + \hbar\sqrt{\frac{\hbar\Omega''(x_0)(v+1)}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right) -$$
$$- \frac{\mu\rho_1}{2\rho}\,H_2 l\sin\left(\frac{x_0}{\rho}\right) - \frac{\mu\rho_2}{2\rho}\,H_3 l +$$
$$+ \hbar\sigma_{\uparrow\downarrow}\left|\frac{e}{c}\,\mathbf{H} - 2\alpha m l\Omega^2(x_0)\,\partial_x\mathbf{R}(x_0)\right|,$$

где $\sigma_{\uparrow\downarrow} = \pm 1$ отвечают направлениям спина вдоль вектора $(e/c)\mathbf{H} - 2\alpha m l \Omega(x_0)^2 \partial_x \mathbf{R}(x_0)$;

2) возбужденные, соответствующие быстроосциллирующим ВКБ-решениям со спектром

$$E_{\mathrm{s}}^{vln} = E_0^{vn} - \hbar\omega_H^{vln} - \hbar\omega_{\mathrm{s}}^{vln} + O(\mu^2)\,,$$

где $E_0^{vn}$ находится из условия квантования Бора – Зоммерфельда

$$\frac{1}{\pi}\int_{x_1}^{x_2}\mathcal{P}\,\mathrm{d}x = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad \mathcal{P} = \sqrt{2m\big(E_0^{vn} - \hbar\Omega(x)(v+1)\big)}\,.$$

Здесь $x_1 < x_2$ суть решения уравнения $\mathcal{P} = 0$,

$$\omega_H^{vnl} = el(2mcT)^{-1}\int_0^T \big\langle \partial_x\mathbf{R}\,(X(x_0,t)), \mathbf{H}\big\rangle\,\mathrm{d}t =$$
$$= el(mcT)^{-1}\int_{x_1}^{x_2}\big\langle\partial_x\mathbf{R},\mathbf{H}\big\rangle\,m\,\mathcal{P}^{-1}\,\mathrm{d}x\,,$$

$$T = 2\int_{x_1}^{x_2} m\,\mathcal{P}^{-1}\,\mathrm{d}x$$

— период замкнутой траектории на уровне энергии $E_0^{vn}$, $\omega_{\mathrm{s}}^{vnl}$ — показатели Флоке матрицы монодромии системы (9) (вещественные в силу самосопряженности матрицы $\big\langle\boldsymbol{\sigma},\mathbf{a}^l(x(t))\big\rangle$ и такие, что $-\pi/T < \omega_{\mathrm{s}}^{vnl} \leqslant \pi/T$). Для локализованных состояний фазы $I_{\mathrm{AB}} = 0$, $I_{\mathrm{B}}^l = 0$.

Спектр *баллистических состояний* имеет вид

$$E = E_0^{vn} - \hbar\omega_H^{vnl} - \hbar\omega_{\mathrm{s}}^{vnl} + \hbar\omega_{\mathrm{B}}^l + O(\mu^2)\,,$$

где $E_0^{vn}$ определяется условием

$$\int_0^{2\pi\rho N}\mathcal{P}\,\mathrm{d}x = 2\pi\hbar n - I_{\mathrm{AB}}\,,$$

$$\omega_H^{vnl} = el(cT)^{-1}\int_0^{2\pi\rho N}\big\langle\partial_x\mathbf{R},\mathbf{H}\,\big\rangle\mathcal{P}^{-1}\,\mathrm{d}x\,,$$

$$T = \int_0^{2\pi\rho N} m\,\mathcal{P}^{-1}\,\mathrm{d}x\,,$$

$\omega_{\mathrm{s}}^{vnl}$ — показатели Флоке системы (9), $\omega_{\mathrm{B}}^l = (\hbar T)^{-1} I_{\mathrm{B}}^l$.

### 4.4. Спин-орбитальное расщепление и теория возмущений

Пусть $\mathbf{H} = 0$, $\alpha \ll (m\Omega)^{-1}$. Тогда поправка $\omega_{\mathrm{s}}^{vnl}$ может быть подсчитана с помощью теории возмущений [2]. Действительно, матрица монодромии уравнения (9)

$$\mathcal{M} = E + 2\alpha m l\int_0^T \Omega\big(X(x_0,t)\big)^2\big\langle\boldsymbol{\sigma},\partial_x\mathbf{R}\big(X(x_0,t)\big)\big\rangle\,\mathrm{d}t + O(\alpha^2)$$

и показатели Флоке с точностью $O(\alpha^2)$ суть собственные числа матрицы

$$2\alpha m l T^{-1}\int_0^T \Omega\big(X(x_0,t)\big)^2\big\langle\boldsymbol{\sigma},\partial_x\mathbf{R}\big(X(x_0,t)\big)\big\rangle\,\mathrm{d}t =$$
$$= 2\alpha m l T^{-1}\int_0^{2\pi\rho N}\Omega(x)\big\langle\boldsymbol{\sigma},\partial_x\mathbf{R}(x)\big\rangle\,m\,\mathcal{P}^{-1}\,\mathrm{d}x\,.$$

Подчеркнем, что теория возмущений работает только при $\alpha \ll (m\Omega)^{-1}$.

### 4.5. Влияние спина на классическую динамику слабовозбужденных состояний в зависимости от направления H

Пусть $|\mathbf{a}^l(x)| \neq 0$ (термы не пересекаются) и $\Omega(x) = \Omega = \text{const}$. Тогда система уравнений $\mathrm{i}\hbar\psi_t^{\nu l} = \hat{L}^{\nu l}\psi^{\nu l}$ имеет быстроосциллирующие ВКБ-решения, которые восстанавливаются по траекториям двух классических систем $m\ddot{x} = -\nabla v_{\uparrow\downarrow}^l$ [14], где

$$v_{\uparrow\downarrow}^l = -\frac{e\hbar}{(2mc)}\left\langle \partial_x \mathbf{R}, \mathbf{H} \right\rangle l - \frac{\sigma_{\uparrow\downarrow}}{2}\,\hbar\left|\mathbf{a}^l(x)\right|,$$
$$\left|\mathbf{a}^l(x)\right| = \sqrt{\omega_H^2 + (2\alpha m\Omega^2 l)^2 - 2\,\frac{e}{c}\,\alpha l\Omega^2\left\langle \partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\right\rangle}\,.$$

Экстремумы $v_{\uparrow\downarrow}^l$ находятся из условия

$$\left(|\mathbf{a}^l(x)| - \sigma_{\uparrow\downarrow}\alpha m\Omega^2\right)\partial_x\left(-\frac{1}{2}\left\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\right\rangle l\right) = 0\,.$$

Точкам минимума $v_{\uparrow\downarrow}^l$ соответствуют "ловушки". Для направления $\sigma_\downarrow$ минимумы и максимумы потенциала $v_{\uparrow\downarrow}^l$ соответствуют минимумам и максимумам $-(1/2)\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\rangle\, l$, т.е. фазовый портрет спиновой частицы качественно совпадает с фазовым портретом аналогичной бесспиновой. Для направления $\sigma_\uparrow$ аналогичная картина имеет место при условии $\alpha m\Omega^2 < |\mathbf{a}^l(x^*)|$, где $x^*$ соответствует точкам минимума и максимума $-(1/2)\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\rangle l$. Для направления $\sigma_\downarrow$ максимум потенциала увеличивается на $(\hbar/2)|\mathbf{a}^l(x^*)|$ по сравнению с максимумом потенциала для бесспиновой частицы, а для $\sigma_\uparrow$ уменьшается на ту же величину. Отсюда следует любопытная возможность *сепарировать спиновые частицы* с заданной проекцией момента $l$: в диапазоне энергий

$$\hbar\Omega(\nu+1) - \frac{\hbar e}{2mc}\left\langle\partial_x\mathbf{R}(x^*), \mathbf{H}\right\rangle l - \frac{\hbar}{2}\left|\mathbf{a}^l(x^*)\right| <$$
$$< E < \hbar\Omega(\nu+1) - \frac{\hbar e}{2mc}\left\langle\partial_x\mathbf{R}(x^*), \mathbf{H}\right\rangle l + \frac{\hbar}{2}\left|\mathbf{a}^l(x^*)\right|$$

частица с направлением спина $\sigma_\uparrow$ будет проходить через трубку, в то время как частица с направлением спина $\sigma_\downarrow$ будет отражаться от нее.

Если $\alpha m\Omega^2 > |\mathbf{a}^l(x^*)|$, то для направления $\sigma_\uparrow$ в центре "магнитной" ловушки (точке минимума $-(1/2)\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\rangle\, l$) возникает барьер — ловушка распадается на две; в точках максимума $-(1/2)\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\rangle\, l$ появляются дополнительные точки минимума.

### 4.6. Переворот спина (спин-флип)

Рассмотрим случай $e/(mc)\mathbf{H} = 2\alpha ml\Omega^2\partial_x\mathbf{R}(x^*)$. Тогда $x^*$ есть точка минимума $-(1/2)\langle\partial_x\mathbf{R}, \mathbf{H}\rangle\, l$, а $|\mathbf{a}^l(x^*)| = 0$. В этом случае в точках $x^*$ имеет место пересечение термов, которому соответствует переворот спина.

В качестве примера возьмем ось в виде дуги окружности $\mathbf{R}(x) = \rho(\cos(x/\rho), \sin(x/\rho), 0)$ и поле $e/(mc)\mathbf{H} = 2\alpha ml\Omega^2(-1, 0, 0)$. Тогда потенциал

$$v_{\uparrow\downarrow}^l = -\hbar\,|l|\,\omega_H \sin\left(\frac{x}{\rho}\right) - \sigma_{\uparrow\downarrow}\hbar\omega_H\left|\sin\left(\frac{\pi}{4} - \frac{x}{2\rho}\right)\right|$$

и $x^* = \pi\rho/2$, причем главный член ВКБ-решения уравнения (3) определяется уравнениями $m\ddot{x} = -(v_\pm^l)'$, где

$$v_\pm^l = -\hbar|l|\,\omega_H \sin\left(\frac{x}{\rho}\right) \mp \hbar\omega_H \sin\left(\frac{\pi}{4} - \frac{x}{2\rho}\right)$$

[31, 32]. Потенциал $v_\pm^l$ не совпадает с потенциалом $v_{\uparrow\downarrow}^l$.

Авторы благодарят за дискуссии В.А. Гейлера и Л.А. Чернозатонского. Работа выполнена при поддержке грантов DFG-РАН и РФФИ 05-01-00968а.

## Список литературы


1. Entin M V, Magarill L I *Phys. Rev. B* **66** 205308 (2002)
2. Магарилл Л И, Энтин М В *ЖЭТФ* **123** 867 (2003)
3. Gantmakher V F, Levinson Y B *Carrier Scattering in Metals and Semiconductors* (Amsterdam: North-Holland, 1987)
4. Доброхотов С Ю *ДАН СССР* **269** 76 (1983)
5. Берлянд Л В, Доброхотов С Ю *ДАН СССР* **296** 80 (1987)
6. de Witt B S *Rev. Mod. Phys.* **29** 377 (1957)
7. Jensen H, Koppe H *Ann. Phys.* (New York) **63** 586 (1971)
8. da Costa R C T *Phys. Rev. A* **23** 1982 (1981)
9. Duclos P, Exner P *Rev. Math. Phys.* **7** 73 (1995)
10. Schuster P C, Jaffe R L *Ann. Phys.* (New York) **307** 132 (2003)
11. Dell'Antonio G F, Tenuta L *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 5605 (2004)
12. Белов В В и др. *Докл. РАН* **393** 460 (2003)
13. Belov V V, Dobrokhotov S Yu, Tudorovskii T Ya *Russ. J. Math. Phys.* **11** 109 (2004)
14. Белов В В, Доброхотов С Ю, Тудоровский Т Я *ТМФ* **141** 267 (2004)
15. Belov V V, Dobrokhotov S Yu, Tudorovskiy T Ya "*Operator separation of variables for adiabatic problems in quantum and wave mechanics*", math-ph/0503041
16. Маслов В П *ДАН СССР* **123** 631 (1958)
17. Маслов В П *Математические аспекты интегральной оптики* (М.: МИЭМ, 1983) [Translated into English: Maslov V P*Rus. J. Math. Phys.* **8** 83 (2001)]
18. Ведерников А И, Чаплик А В *ЖЭТФ* **117** 449 (2000)
19. Entin M V, Magarill L I *Phys. Rev. B* **64** 085330 (2001)
20. Hamilton J *Aharonov–Bohm and Other Cyclic Phenomena* (New York: Springer-Verlag, 1997)
21. Маслов В П *Теория возмущений и асимптотические методы* (М.: Изд-во МГУ, 1965)
22. Маслов В П *Операторные методы* (М.: Наука, 1973)
23. Карасев М В, Маслов В П *Нелинейные скобки Пуассона: Геометрия и квантование* (М.: Наука, 1991)
24. Foldy L L, Wouthuysen S A *Phys. Rev.* **78** 29 (1950)
25. Blount E I *Phys. Rev.* **126** 1636 (1962)
26. Panati G, Spohn H, Teufel S "*Space-adiabatic perturbation theory*", math-ph/0201055 (v3)
27. Карасев М В *Функ. анализ и его прилож.* **24** (2) 24 (1990)
28. Маслов В П *Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях* (М.: Наука, 1977)
29. Маслов В П, Федорюк М В *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики* (М.: Наука, 1976)
30. Brüning J, Dobrokhotov S Yu, Pankrashkin K V *Russ. J. Math. Phys.* **9** 14 (2002)
31. Кучеренко В В *Изв. АН СССР, Сер. мат.* **38** 625 (1974)
32. Gordon A, Avron J E *Phys. Rev. Lett.* **85** 34 (2000)