Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2017, т. 43, № 3, с. 456–470

К теории собственных спиновых состояний и спин-орбитального взаимодействия квазидвумерных электронов

А.А. Еремко, В.М. Локтев

Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины
ул. Метрологическая, 14-б, г. Киев, 03143, Украина

Национальный технический университет Украины «КПИ», пр. Победы, 37, г. Киев, 03056, Украина
E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 29 июля 2016 г., опубликована онлайн 24 января 2017 г.

На основе фундаментального уравнения Дирака поставлена и аналитически решена задача о спектре электронов в квазидвумерном пространстве (например, интерфейсы, гетероструктуры, поверхности). Показано, что использование для решения уравнения Дирака метода унитарных преобразований либо метода спиновых инвариантов приводит к тождественным результатам. Найдены собственные биспиноры уравнения Дирака и продемонстрировано, как возникает их разнообразие, обеспечиваемое произвольностью направления оси квантования спинового момента. Рассмотрены особенности поведения электронов в параболической квантовой яме.

Спираючись на фундаментальне рівняння Дірака, поставлено і аналітично розв'язано задачу щодо спектра електронів у квазідвовимірному просторі (наприклад, інтерфейси, гетероструктури, поверхні). Показано, що використання для розв'язку рівняння Дірака методу унітарних перетворень або методу спінових інваріантів призводить до тотожніх результатів. Знайдені власні біспінори рівняння Дірака та продемонстровано, як виникає їх різномаїття, яке забезпечується довільністю напрямку осі квантування спінового моменту. Розглянуто особливості поведінки електронів у параболічній квантовій ямі.

PACS: 03.65.Pm Релятивистское волновое уравнение;
71.70.Ej Спин-орбитальное взаимодействие, зеемановское и штарковское расщепление, эффект Яна–Теллера;
73.21.Fg Квантовые ямы;
73.22.Dj Одночастичные состояния.

Ключевые слова: уравнение Дирака, спиновые состояния, спин-орбитальное взаимодействие, расщепление Рашбы.

1. Введение

В 1960 г. Э.И. Рашба, изучая движение электронов в областях неоднородности кристаллического потенциала, показал, что в этом случае спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) приобретает специфическую форму [1]. Отмеченная неоднородность возникает, к примеру, на границах раздела двух полупроводников либо в сверхтонких металлических слоях, когда нарушается пространственная симметрия относительно операции инверсии. Следствием такого СОВ служит расщепление энергий одноэлектронных состояний (эффект, или расщепление, Рашбы) для их (электронов) спинов, имеющих разные проекции относительно направления волнового вектора (см. также [2]). Упомянутое расщепление, которое появляется в обратном пространстве, коренным образом отличается от снятия вырождения тех же состояний по направлению спина внешним магнитным полем, имеющем место в пространстве энергий. Наличие расщепления Рашбы свидетельствует, что спин квазидвумерных (квази-2D) электронов прямо связан с их импульсом, становясь «плохим», т.е. не сохраняющимся, квантовым числом, что присуще, прежде всего, релятивистским частицам.

Если точнее, то собственными состояниями оказываются состояния со спином, направленным перпендикулярно вправо и влево от направления движения в отличие от *спиральных* состояний свободных частиц, в которых спин параллелен импульсу. Не будет преувеличением сказать, что именно работа [1] заложила фундамент современного направления микроэлектроники, которое в 1996 г. получило название *спинтроники* и которое основано на возможности управления «плоским» движением заряженных частиц (электронов, дырок), благодаря наличию у них спина, а не заряда. Устройства, которые допускают манипулирование спином внешним электрическим полем, позволяют осуществлять спиновый контроль всевозможных процессов, запись и считывание информации и вообще исследовать любой спин-зависимый транспорт. Теперь вопросы спинтроники относятся не только к физике (включая физику низких (гелиевых) температур, поскольку зачастую изучение соответствующих явлений проводится при сверхнизких (милликельвиновых) температурах), но и к технике (см., например, [3–6]).

Как известно, описание СОВ в виде Рашбы обычно опирается на уравнение Шредингера, полученное из уравнения Дирака (УД) в качестве нерелятивистского предела последнего, и вследствие этого содержащее слагаемые, которые имеют порядок малости c^{-1} либо c^{-2} (c — скорость света в вакууме). Одним из них является поправка Томаса, получившая название оператора СОВ (см. учебники [7,8]) и долгие годы считавшаяся однозначно определенной. Исследования последнего времени [9,10] обнаружили, однако, что УД для электронов в квантовых ямах (КЯ) содержит и некоторые другие решения, роль которых в физике конденсированного состояния, насколько известно, ранее не анализировалась. А это важно, так как такие решения (или, другими словами, электроны в этих состояниях) могут проявлять несколько иной вид СОВ. Следует отметить, что утверждение о вариативности решений УД и попытки их поиска можно найти в работах по релятивистской квантовой элктродинамике (см. [11]), но без отнесения их (решений) к каким-либо физическим ситуациям.

В работе [9], наоборот, рассмотрена достаточно актуальная физическая задача о поведении релятивистских электронов в гетероструктурах либо в КЯ и показано, что для них дираковский гамильтониан коммутирует, как минимум, с тремя так называемыми спиновыми операторами, получившими название *спиновых инвариантов* [12]. Это обстоятельство позволило найти три линейно независимые собственные решения УД, лишь одному из которых соответствует СОВ, известное как СОВ Рашбы, а два других имеют отличную от последнего форму.

В работе [10] та же задача решалась без какого бы то ни было привлечения спиновых инвариантов, однако аналитически найденное общее решение УД, зависящее от некоторых произвольных параметров, для их отдельных значений точно сводилось к выписанным в [9] решениям. Само решение при этом удалось получить с помощью, в известной степени, постулированного унитарного преобразования, несколько отличающегося от стандартного преобразования Фолди–Вутхайзена, которое обычно применяется для диагонализации гамильтониана Дирака (см. [7,8]). В связи с этим ниже предпринята попытка, во-первых, последовательного решения или нахождения собственных спиновых состояний УД и прояснение их физической природы, а во-вторых, аргументации того, что оба использованных в работах [9,10] способа поиска решений УД являются эквивалентными и их выбор определяется лишь соображениями удобства. Мы также рассчитываем энергетический спектр и спиновое распределение электронов в параболической КЯ, которые меняются по сравнению с ямой прямоугольной формы, исследованной в работах [9,10]. Заранее также заметим, что ради простоты и конкретности изложения мы, как и в предыдущих работах, ограничиваемся внешним потенциалом, характерным именно для квази-2D частиц, или частиц в квази-2D структурах, хотя и исследуем применительно к ним УД, переходя к нерелятивистскому («твердотельному») приближению на основе анализа полученных точных решений, а не из решения приближенного, разложенного по степеням c^{-1} УД.

2. Метод унитарных преобразований

Хорошо известно, что стационарное УД для частиц массы m во внешнем потенциале $V(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\left[c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{p}}+V(\mathbf{r})\hat{I}+mc^2\hat{\beta}\right]\Psi = E\Psi, \qquad (1)$$

где «вектор» $\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_j \mathbf{e}_j\hat{\alpha}_j$ задан в некоторой системе координат с ортами $\mathbf{e}_j$ ($j = x, y, z$), компоненты $\hat{\alpha}_j$ и $\hat{\beta}$ — 4×4 матрицы Дирака (МД), $\hat{I}$ — единичная матрица, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ — оператор импульса, а $\Psi(\mathbf{r})$ — четырехкомпонентная функция координат (биспинор).

В уравнении (1) МД, как правило, используются в представлении Дирака–Паули (или в стандартном представлении), согласно которому

$$\hat{\alpha}_j = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_j \\ \hat{\sigma}_j & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{I}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{I}_2 \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

где $\hat{I}_2$ — единичная 2×2 матрица, а

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (3)$$

— матрицы Паули, которые изначально предполагают выделенность оси z, ибо только ей отвечает диагональная матрица.

Как отмечалось, будем рассматривать случай, когда потенциал $V(\mathbf{r})$ изменяется только в одном направлении, которому отвечает предполагаемая неоднородность пространства. Если направить ось z вдоль этого направления, то внешний потенциал в (1) как функция координат сведется к равенству $V(\mathbf{r}) = V(z)$. Тогда состояние частицы с определенным значением 2D импульса $\mathbf{p}_\perp = \hbar\mathbf{k}_\perp = \hbar(k_x\mathbf{e}_x + k_y\mathbf{e}_y)$ в плоскости xy задается функцией

$$\Psi_{\mathbf{k}_\perp}(\mathbf{r}) = \exp(i(k_x x + k_y y))\Psi(z), \tag{4}$$

подстановка которой в УД (1) дает

$$\hat{H}_D(z)\Psi(z) \equiv$$
$$\equiv\left[-i\hbar c\hat{\alpha}_z\frac{d}{dz} + c\hbar\mathbf{k}_\perp\hat{\boldsymbol{\alpha}}_\perp + V(z)\hat{I} + mc^2\hat{\beta}\right]\Psi(z) = E\Psi(z), \tag{5}$$

где $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_\perp = \hat{\alpha}_x\mathbf{e}_x + \hat{\alpha}_y\mathbf{e}_y$, а гамильтониан $\hat{H}_D(z)$ отвечает одномерному движению частицы в потенциале $V(z)$, когда ее свбодное движение в плоскости xy задано оператором $\mathbf{k}_\perp\hat{\boldsymbol{\alpha}}_\perp + mc^2\hat{\beta}$.

Матричное уравнение (5) для биспинора $\Psi(z) = \left(\psi_1(z)\psi_2(z)\psi_3(z)\psi_4(z)\right)^T$, определенного в (4), нетрудно представить в явном виде для компонент $\psi_j(z) \equiv \psi_j$:

$$\begin{cases} -i\hbar c\psi_1' + c\hbar k_\perp e^{-i\varphi_\perp}\psi_2 - \left[mc^2 - V(z)\right]\psi_3 = E\psi_3, \\ i\hbar c\psi_2' + c\hbar k_\perp e^{i\varphi_\perp}\psi_1 - \left[mc^2 - V(z)\right]\psi_4 = E\psi_4, \\ -i\hbar c\psi_3' + c\hbar k_\perp e^{-i\varphi_\perp}\psi_4 + \left[mc^2 + V(z)\right]\psi_1 = E\psi_1, \\ i\hbar c\psi_4' + c\hbar k_\perp e^{i\varphi_\perp}\psi_3 + \left[mc^2 + V(z)\right]\psi_2 = E\psi_2, \end{cases} \tag{6}$$

где штрих здесь и ниже обозначает дифференцирование по z — $\psi_j' \equiv d\psi_j/dz$. При записи этих уравнений использована следующая параметризация вектора $\mathbf{k}_\perp$: $k_x = k_\perp\cos\varphi_\perp$, $k_y = k_\perp\sin\varphi_\perp$, $k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

Выше говорилось, что система (6) допускает точные решения, отвечающие различным спиновым состояниям квази-2D электронов. Действительно, преобразуем УД (5), записав биспинор $\Psi(z)$ в виде

$$\Psi(z) = \hat{U}_\perp^\dagger\tilde{\Psi}(z), \tag{7}$$

где унитарный оператор

$$\hat{U}_\perp = \exp\left(i\frac{\vartheta_\perp}{2}\hat{\boldsymbol{\Gamma}}_\perp\mathbf{e}_\perp\right) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_\perp\left(\varepsilon_\perp + mc^2\right)}}\begin{pmatrix} \left(\varepsilon_\perp + mc^2\right)\hat{I}_2 & c\hbar\mathbf{k}_\perp\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ -c\hbar\mathbf{k}_\perp\hat{\boldsymbol{\sigma}} & \left(\varepsilon_\perp + mc^2\right)\hat{I}_2 \end{pmatrix}, \tag{8}$$

содержит дисперсию

$$\varepsilon_\perp \equiv \varepsilon_\perp(\mathbf{k}_\perp) = \sqrt{m^2c^4 + c^2\hbar^2k_\perp^2}, \quad k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2 \tag{9}$$

свободного 2D движения релятивистской частицы. Легко проверить, что матрица $\hat{U}_\perp$, в которой оператор $\hat{\boldsymbol{\Gamma}}_\perp = i\hat{\boldsymbol{\alpha}}_\perp\hat{\beta}$, будучи преобразованием Фолди–Вудхайзена для такого движения, частично диагонализует оператор $\hat{H}_D(z)$ в (5), «убирая» в нем недиагональную матрицу $\mathbf{k}_\perp\hat{\boldsymbol{\alpha}}_\perp$, при условии, что $\mathbf{e}_\perp = \mathbf{k}_\perp/k_\perp = \cos\varphi_\perp\mathbf{e}_x + \sin\varphi_\perp\mathbf{e}_y$ и $\operatorname{tg}\vartheta_\perp = \hbar k_\perp/mc$.

Это означает, что УД для «нового» биспинора $\tilde{\Psi}(z)$ приобретает вид (ср. (5))

$$\hat{\tilde{H}}_D(z)\tilde{\Psi}(z) = E\tilde{\Psi}(z), \tag{10}$$

$$\hat{\tilde{H}}_D(z) = \hat{U}_\perp\hat{H}_D(z)\hat{U}_\perp^\dagger = -i\hbar c\hat{\alpha}_z\frac{d}{dz} + \varepsilon_\perp\hat{\beta} + V(z)\hat{I}. \tag{11}$$

Важно, что если теперь матричное уравнение (10) записать как систему четырех уравнений для компонент $\tilde{\psi}_j$ биспинора $\tilde{\Psi}(z)$, то она в отличие от системы (6) для ψ_j распадается на две не связанные между собой пары уравнений, одна из которых объединяет компоненты $\tilde{\psi}_1$ и $\tilde{\psi}_3$, а другая — $\tilde{\psi}_2$ и $\tilde{\psi}_4$:

$$\begin{cases} -i\hbar c\tilde{\psi}'_3 + \left(V + \varepsilon_\perp\right)\tilde{\psi}_1 = E\tilde{\psi}_1, \\ -i\hbar c\tilde{\psi}'_1 + \left(V - \varepsilon_\perp\right)\tilde{\psi}_3 = E\tilde{\psi}_3, \end{cases} \tag{12}$$

$$\begin{cases} i\hbar c\tilde{\psi}'_4 + \left(V + \varepsilon_\perp\right)\tilde{\psi}_2 = E\tilde{\psi}_2, \\ i\hbar c\tilde{\psi}'_2 + \left(V - \varepsilon_\perp\right)\tilde{\psi}_4 = E\tilde{\psi}_4, \end{cases} \tag{13}$$

что по сути и обеспечивает их точное аналитическое решение. При этом ясно, что обе пары собственных функций систем (12) и (13) должны находиться при выполнении общей нормировки биспинора $\tilde{\Psi}(z)$.

Покажем, что спиновая переменная фактически содержится в уравнении (10). Для этого рассмотрим его в области постоянного потенциала $V(z) = V = \text{const}$ (такое допущение справедливо, в частности, для прямоугольных КЯ, включая несимметричные). В этом случае решение уравнения (10) можно найти в полной аналогии с решением уравнения (5) путем использования унитарной матрицы

$$\hat{U}_z = \frac{1}{\sqrt{2\hat{\varepsilon}(\mathbf{k})\left[\hat{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \varepsilon_\perp\right]}}\times$$
$$\times\begin{pmatrix} \left[\hat{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \varepsilon_\perp\right]\hat{I}_2 & \hat{\sigma}_z c\hat{p}_z \\ -\hat{\sigma}_z c\hat{p}_z & \left[\hat{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \varepsilon_\perp\right]\hat{I}_2 \end{pmatrix}, \tag{14}$$

в которой величина

$$\hat{\varepsilon}(\mathbf{k}) \equiv \hat{\varepsilon} = \sqrt{\varepsilon_\perp^2(\mathbf{k}_\perp) + \hbar^2c^2\hat{k}_z^2}, \quad \hat{k}_z = \hat{p}_z/\hbar \tag{15}$$

является оператором свободного одномерного — вдоль z — движения релятивистской частицы с «энергией покоя» $\varepsilon_\perp(\mathbf{k}_\perp)$, играя, до некоторой степени, роль собственной энергии. При этом недиагональные элементы матрицы $\hat{U}_z$ гласят, что такое движение сопровождается перепутыванием операторов (ср. (8)) пространственной и спиновой переменных. В целом, преобразование (14) есть не что иное, как составляющая некоторого полного преобразования типа Фолди–Вудхайзена, которое в данном случае осуществляется в два этапа.

Непосредственное применение оператора (14) преобразует УД (10) в уравнение для биспинора $\Psi^{(FW)}(z) = \hat{U}_z\tilde{\Psi}$ с гамильтонианом

$$\hat{H}_{FW} = \hat{U}_z \hat{\tilde{H}}_D(z)\hat{U}_z^{\dagger} = \hat{\beta}\hat{\varepsilon}:$$

$$\hat{H}_{FW}\Psi^{(FW)}(z) \equiv \hat{\beta}\hat{\varepsilon}\Psi^{(FW)}(z) = (E - V)\Psi^{(FW)}(z), \tag{16}$$

решение которого ввиду диагональности МД $\hat{\beta}$ (см. (2)) имеет мультипликативный вид

$$\Psi^{(FW)}(z) = \psi(z)\Phi. \tag{17}$$

Здесь $\psi(z)$ — собственная функция оператора $\hat{\varepsilon}_z$, т.е.

$$\hat{\varepsilon}\psi(z) = \varepsilon(\mathbf{k})\psi(z), \tag{18}$$

причем собственное значение $\varepsilon(\mathbf{k})$, как видно из определения (15), зависит от всех компонент волнового вектора $\mathbf{k}$.

Второй сомножитель в (17), функция Φ, оказывается при этом не зависящим от пространственной координаты z биспинором, который задается матричным уравнением $\varepsilon(\mathbf{k})\hat{\beta}\Phi = (E - V)\Phi$, или в явной форме:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon\hat{I}_2 & 0 \\ 0 & -\varepsilon\hat{I}_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi_u \\ \chi_d \end{pmatrix} = (E - V)\begin{pmatrix} \chi_u \\ \chi_d \end{pmatrix}, \tag{19}$$

что естественным образом предполагает существование двух не зависимых спиноров — верхнего χ_u и нижнего χ_d и вводит в теорию дискретную переменную, отвечающую, как известно, механическому моменту частиц (спину). Иными словами, мы приходим к заключению, что собственными биспинорами уравнения (19) являются $\Phi_u = (\chi_u\ 0)^T$ и $\Phi_d = (0\ \chi_d)^T$, в которых, необходимо подчеркнуть, спиноры χ_u и χ_d следует считать *произвольными*. Последнее, в частности, означает, что они никоим образом не «привязаны» к исходной координатной системе xyz и могут иметь оси квантования, отличные от z, в том числе, что также нетривиально, и разные между собой*. Тем самым решение УД (по крайней мере, для случая квази-2D электронов) обладает внутренним произволом, если говорить об осях квантования спинового момента частиц (а также античастиц). Речь идет, на наш взгляд, о принципиальном обстоятельстве, которое, насколько известно, ранее оставалось вне поля зрения при поиске решений УД для задач разного характера. Уместно лишь напомнить, что выбор соответствующих систем координат и осей квантования должен диктоваться физическими условиями, как то: минимумом энергии, присутствием полей и т.п.

Если же продолжить решение УД, то собственным биспинорам Φ_u и Φ_d будут соответствовать собственные значения

$$E - V = \pm\varepsilon(\mathbf{k}) \equiv \pm\varepsilon. \tag{20}$$

Это видно из того, что выражение (15) содержит лишь оператор $\hat{p}_z^2$; следовательно, собственной функцией оператора $\hat{\varepsilon}(\mathbf{k})$ будет именно собственное решение одномерного уравнения Лапласа

$$-\psi''(z) = k_z^2\psi(z),$$

откуда с учетом определения (9) находим, что искомая энергия приобретает окончательный вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2\left(\mathbf{k}_\perp^2 + k_z^2\right)}, \tag{21}$$

приведенный в работе [10]. В результате, решениями УД (16) оказываются биспиноры

$$\Psi_+^{(FW)}(z) = \begin{pmatrix} \psi(z)\chi_u \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_-^{(FW)}(z) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi(z)\chi_d \end{pmatrix}, \tag{22}$$

для состояний с положительной и отрицательной энергией ε соответственно (20).

Найденные биспиноры позволяют с помощью использования обратных унитарных преобразований (14) и (8) восстановить собственные функции уравнения (10), а затем и (5):

$$\tilde{\Psi}(z) = \hat{U}_z^{\dagger}\Psi^{(FW)}(z),$$

$$\Psi(z) = \hat{U}_\perp^{\dagger}\tilde{\Psi}(z) = \hat{U}_\perp^{\dagger}\hat{U}_z^{\dagger}\Psi^{(FW)}(z).$$

Тем самым математическая задача нахождения собственных функций и собственных значений УД исчерпана, поскольку все составляющие унитарных матриц $\hat{U}_\perp$ и $\hat{U}_z$, а также биспиноры $\Psi^{(FW)}(z)$ известны. При этом биспиноры (22) ортогональны и характеризуются квантовым числом «+» или «−», однако не могут считаться такими, что полностью задают состояние, которое с физической точки зрения должно также содержать информацию о спиновой переменной. Способам ее задания посвящен следующий раздел.

* Как будет видно ниже, предположение о квантовании спина в той же системе координат xyz приводит лишь к одному решению УД, СОВ в котором имеет форму СОВ Рашбы.

3. Выбор и параметризация спиновых состояний

Спиновое состояние частицы можно задать с помощью собственных значений коммутирующего с гамильтонианом $\hat{H}_D(z)$ (см. (5)) спинового оператора, для которого функция (4) также является собственным биспинором. Во Введении упоминалось: имеется несколько таких (некоммутирующих друг с другом) спиновых инвариантов, поэтому выбор конкретного спинового базиса тоже остается произвольным, что обязано наличию вырождения относительно направления спина и позволяет использовать спинорный базис, отвечающий произвольной ориентации спина в пространстве.

Как было показано выше, решение УД (5) свелось к уравнению (16) с гамильтонианом $\hat{H}_{FW}$, поэтому спиноры χ_u и χ_d в (22) можно определить так, чтобы биспиноры $\Psi_{\pm}^{(FW)}$ были собственными и для какого-либо спинового оператора, коммутирующего с $\hat{H}_{FW}$. В качестве такового естественно, на наш взгляд, выбрать спиновую матрицу

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{pmatrix} \tag{23}$$

и считать, что в общем случае проекция $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\mathbf{e}$ спинового момента на произвольно направленный единичный вектор

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}_x \sin\theta\cos\varphi + \mathbf{e}_y \sin\theta\sin\varphi + \mathbf{e}_z \cos\theta \tag{24}$$

есть не что иное, как ось квантования спина. Тогда, подставляя биспиноры (22) в уравнение $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\mathbf{e}\tilde{\tilde{\Psi}}_{\pm} = \sigma\tilde{\tilde{\Psi}}_{\pm}$, находим, что имеют место соотношения:

$$\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi(z)\chi_u \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(z)\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e}\chi_u \\ 0 \end{pmatrix} = \sigma\begin{pmatrix} \psi(z)\chi_u \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ \psi(z)\chi_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi(z)\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e}\chi_d \end{pmatrix} = \sigma\begin{pmatrix} 0 \\ \psi(z)\chi_d \end{pmatrix},$$

откуда следует, что спиноры χ_u и χ_d должны быть собственными функциями матрицы

$$\hat{s} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} = \begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}, \tag{25}$$

удовлетворяющими, в свою очередь, уравнению $\hat{s}\chi_\sigma = \sigma\chi_\sigma$ с $\sigma = \pm 1$.

Его решением с точностью до общего фазового множителя, которым мы здесь и далее пренебрегаем, является ортонормированная пара

$$\chi_1(\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1}(\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \tag{26}$$

в которой углы θ и φ (см. (24)) определяют, как было принято, направление оси квантования в системе xyz, причем аргументы обоих спиноров (26) могут быть нагружены, вообще говоря, индексами «u» и «d» в соответствии с их присутствием в (22). Таким образом, собственные биспиноры, или решения УД, становятся зависимыми не только от квантового числа σ, но и являются функциями углов θ и φ. Их нет в исходном УД (1) и последующих унитарных преобразованиях, которые фиксированы в системе координат xyz, но, с другой стороны, не видно физических причин *a priori* полагать, что исходная ось z с необходимостью является осью квантования собственного механического момента частиц.

В то же время хорошо известно, что путем поворота системы координат один спинорный базис может быть трансформирован в другой, что осуществляется унитарным оператором

$$\hat{U}_\Sigma = \exp\left(i\frac{\vartheta_\Sigma}{2}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\mathbf{e}\right),$$

$$\mathbf{e} = \gamma_x\mathbf{e}_x + \gamma_y\mathbf{e}_y + \gamma_z\mathbf{e}_z, \quad \mathbf{e}^2 = 1, \tag{27}$$

в котором $\sum_{j=x,y,z}\gamma_j^2 = 1$, и который в явном виде представлен как матрица

$$\hat{U}_\Sigma = \cos\frac{\vartheta_\Sigma}{2}\hat{I} + i\sin\frac{\vartheta_\Sigma}{2}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\mathbf{e} =$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\vartheta_\Sigma}{2}\hat{I}_2 + i\sin\dfrac{\vartheta_\Sigma}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} & 0 \\ 0 & \cos\dfrac{\vartheta_\Sigma}{2}\hat{I}_2 + i\sin\dfrac{\vartheta_\Sigma}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} \end{pmatrix} \equiv$$

$$\equiv \begin{pmatrix} \hat{\omega} & 0 \\ 0 & \hat{\omega} \end{pmatrix}. \tag{28}$$

Нетрудно убедиться, что ее диагональный элемент $\hat{\omega} = \exp[i(\vartheta_\Sigma/2)\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e}]$ — это оператор бинарного спинорного преобразования, в котором параметры Кейли–Клейна [13] могут быть выражены через параметры оператора (27). Выберем последние так, чтобы операция рассматриваемого поворота совмещала исходную систему координат с собственной системой координат спина, т.е. такой, одна из осей которой совпадает с его осью квантования. Другими словами, осуществим преобразование

$$\hat{U}_\Sigma^\dagger\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\mathbf{e}\hat{U}_\Sigma =$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{\omega}^\dagger & 0 \\ 0 & \hat{\omega}^\dagger \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{e} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\omega} & 0 \\ 0 & \hat{\omega} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\omega}^\dagger\hat{s}\hat{\omega} & 0 \\ 0 & \hat{\omega}^\dagger\hat{s}\hat{\omega} \end{pmatrix},$$

где использовано определение (25), и потребуем, чтобы выполнялось условие*

$$\hat{\omega}^{\dagger}\hat{s}\hat{\omega} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (29)$$

Поскольку, как следует из (28),

$$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta_{\Sigma}}{2} + i\gamma_z \sin\frac{\vartheta_{\Sigma}}{2} & i\left(\gamma_x - i\gamma_y\right)\sin\frac{\vartheta_{\Sigma}}{2} \\ i\left(\gamma_x + i\gamma_y\right)\sin\frac{\vartheta_{\Sigma}}{2} & \cos\frac{\vartheta_{\Sigma}}{2} - i\gamma_z \sin\frac{\vartheta_{\Sigma}}{2} \end{pmatrix} \equiv$$

$$\equiv \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix},$$

то видно, что матрица $\hat{\omega}$ непосредственно задается параметрами Кейли–Клейна α и β, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. В частности, при $\alpha = \exp(-i\varphi/2)\cos(\theta/2)$ и $\beta = \exp(-i\varphi/2)\sin(\theta/2)$ условие (29) выполняется.

Таким образом, получаем, что матрица

$$\hat{\omega} \equiv \hat{\omega}(\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2} & \mathrm{e}^{-i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2} \\ -\mathrm{e}^{i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2} & \mathrm{e}^{i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \qquad (30)$$

преобразует собственные спиноры (26) матрицы (25) в собственные спиноры матрицы (29), каковыми являются

$$\chi_1(0,0) \equiv \chi_1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1}(0,0) \equiv \chi_{-1}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \qquad (31)$$

Фактически они совпадают со спинорами $\chi_{\sigma}(\theta,\varphi)$ (26) при $\theta = \varphi = 0$. Как видно, связь спиноров (26) и (31) обеспечивается соотношением

$$\chi_{\sigma}(\theta,\varphi) = \hat{\omega}(\theta,\varphi)\chi_{\sigma}(0),$$

которое позволяет переписать биспиноры (22) в виде

$$\Psi_{\pm}^{(FW)}(z) \to \Psi_{\pm,\sigma}^{(FW)}(z) = \hat{U}_{\Sigma}\Psi_{\pm,\sigma}^{(FW)}(z\,|\,0),$$

где биспинор $\Psi_{\pm,\sigma}^{(FW)}(z\,|\,0)$ содержит спиноры (31), определенные, как говорилось, в собственной системе координат. В результате, с учетом (27) выражения (22) приобретает форму

$$\Psi_{+,\sigma}^{(FW)}(z) = \begin{pmatrix} \psi(z)\hat{\omega}\chi_{\sigma}(0) \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{-,\sigma}^{(FW)}(z) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi(z)\hat{\omega}\chi_{\sigma}(0) \end{pmatrix}, \qquad (32)$$

включающую свободные параметры через зависимость от них оператора $\hat{\omega}$ (см. (30)).

4. Собственные биспиноры уравнения Дирака

Дальнейшее рассмотрение проведем на примере биспиноров, соответствующих положительным энергиям (см. (20)), поэтому индекс «+» будем опускать. Тогда с учетом (32) и явного вида оператора (14) найдем биспинор

$$\tilde{\Psi}_{\sigma}(z) = \hat{U}_z^{\dagger}\Psi_{\sigma}^{(FW)}(z) =$$

$$= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\hat{\varepsilon}_z + \varepsilon_{\perp}}{2\hat{\varepsilon}_z}}\psi(z)\hat{\omega}\chi_{\sigma}(0) \\ \frac{\hat{\sigma}_z c\hat{p}_z}{\sqrt{2\hat{\varepsilon}_z(\hat{\varepsilon}_z + \varepsilon_{\perp})}}\psi(z)\hat{\omega}\chi_{\sigma}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\sigma}(z)\hat{\omega}\chi_{\sigma}(0) \\ v_{\sigma}(z)\hat{\omega}_d\chi_{\sigma}(0) \end{pmatrix}, \qquad (33)$$

который есть не что иное, как решение УД (10). Здесь введены обозначения

$$u_{\sigma}(z) = \sqrt{\frac{\hat{\varepsilon}_z + \varepsilon_{\perp}}{2\hat{\varepsilon}_z}}\psi(z), \quad v_{\sigma}(z) = \frac{\sigma c\hat{p}_z}{\sqrt{2\hat{\varepsilon}_z(\hat{\varepsilon}_z + \varepsilon_{\perp})}}\psi(z) \qquad (34)$$

для функций, получающихся как результат действия соответствующих операторов на функцию $\psi(z)$ (см. (17)), учтено очевидное равенство $\hat{\sigma}_z\chi_{\sigma}(0) = \sigma\chi_{\sigma}(0)$ и определена матрица

$$\hat{\omega}_d \equiv \hat{\omega}_d(\theta,\varphi) = \hat{\sigma}_z\hat{\omega}\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2} & -\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2} \\ \mathrm{e}^{i\varphi/2}\sin\frac{\theta}{2} & \mathrm{e}^{i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \qquad (35)$$

позволяющая несколько иначе записать нижний спинор биспинора (33), чем и объясняется использование для нее (матрицы) индекса «*d*». Поскольку при этом матрица $\hat{\omega}$ «вращает» исключительно верхний спинор, ниже мы припишем ей индекс «*u*», т.е. $\hat{\omega} \to \hat{\omega}_u$. Примечательно, что спиноры биспинора (33) при одном и том же повороте осей испытывают действие неидентичных унитарных операторов — $\hat{\omega}_u$ (30) и $\hat{\omega}_d$ (35).

В итоге, биспинор (33) можно переписать в виде

$$\tilde{\Psi}_{\sigma}(z) = \begin{pmatrix} u_{\sigma}(z)\hat{\omega}_u\chi_{\sigma}(0) \\ v_{\sigma}(z)\hat{\omega}_d\chi_{\sigma}(0) \end{pmatrix} =$$

$$= \hat{R}\begin{pmatrix} u_{\sigma}(z)\chi_{\sigma}(0) \\ v_{\sigma}(z)\chi_{\sigma}(0) \end{pmatrix} = \hat{R}\tilde{\Psi}_{\sigma}(z\,|\,0), \qquad (36)$$

* Казалось бы, постулированную матрицу следовало бы обозначить $\hat{\sigma}_z$ (см. (3)), однако в случае (29) речь идет о такой матрице, но в *другой* (т.е. *не* исходной) системе координат.

где введена унитарная матрица

$$\hat{R} \equiv \hat{R}(\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} \hat{\omega}_u & 0 \\ 0 & \hat{\omega}_d \end{pmatrix}, \quad \hat{R}^{\dagger}(\theta,\varphi)\hat{R}(\theta,\varphi) = \hat{I}, \quad (37)$$

действующая на биспинор

$$\tilde{\Psi}_{\sigma}(z\,|\,0) = \begin{pmatrix} u_{\sigma}(z)\chi_{\sigma}(0) \\ v_{\sigma}(z)\chi_{\sigma}(0) \end{pmatrix}$$

или, если раскрыть, биспиноры

$$\tilde{\Psi}_1(z\,|\,0) = \begin{pmatrix} u_1 \\ 0 \\ v_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\Psi}_{-1}(z\,|\,0) = \begin{pmatrix} 0 \\ u_{-1} \\ 0 \\ v_{-1} \end{pmatrix} \qquad (38)$$

для каждой из спиновых проекций $\sigma = \pm 1$. Разумеется, не представляет труда аналогично рассмотреть и биспиноры, отвечающие отрицательным энергиям.

Ранее биспинор (33) был определен равенством $\tilde{\Psi}(z) = \hat{U}_z^{\dagger}\Psi^{(FW)}(z)$. Однако матрица (14) дает решение УД лишь в однородном пространстве. Когда же потенциал зависит от пространственной переменной, использование оператора $\hat{U}_z$ вычисления не облегчает, и более конструктивно работать с биспинором (36), в котором зависимость от спиновой переменной переносится на оператор $\hat{R}(\theta,\varphi)$ (37). Уместно при этом заметить, что биспиноры (38) остаются частным случаем собственных функций систем уравнений (12), (13), когда состоянию $\sigma = 1$ отвечает решение, содержащее $\tilde{\psi}_1 = u_1(z)$, $\tilde{\psi}_3 = v_1(z)$ для системы (12) и тривиальное $\tilde{\psi}_2 = \tilde{\psi}_4 = 0$ для (13), а в случае $\sigma = -1$, наоборот, тривиальное решение системы (12) $\tilde{\psi}_1 = \tilde{\psi}_3 = 0$ и $\tilde{\psi}_2 = u_{-1}(z)$, $\tilde{\psi}_4 = v_{-1}(z)$ для системы (13).

Что касается общего случая, то, зная соотношение (36), можно записать выражение для искомого биспинора (7), которое приобретает вид

$$\Psi_{\sigma}(z) = \hat{U}_{\perp}^{\dagger}\hat{R}\tilde{\Psi}_{\sigma}(z\,|\,0). \qquad (39)$$

При этом легко видеть, что гамильтониан $\hat{\tilde{H}}_D(z)$ в (10) остается инвариантным относительно преобразования $\hat{R}(\theta,\varphi)$, из чего немедленно следует, что если какой-либо биспинор типа $\tilde{\Psi}(z)$ является собственным для оператора (11), то и «повернутый» согласно преобразованию (37) биспинор $\hat{R}\tilde{\Psi}(z)$ также удовлетворит соответствующее УД. В свободном случае это не приводит к нетривиальным следствиям. Однако в присутствии внешних полей в силу неизбежного «зацепления» пространственных и спиновых степеней свободы, получившего название СОВ, функции $\tilde{\Psi}(z)$ и $\hat{R}\tilde{\Psi}(z)$ теряют эквивалентность, а энергетический спектр становится зависящим от спиновой степени свободы, что, собственно, является предметом последующего рассмотрения УД с конкретно заданным потенциалом $V(z)$.

5. Использование спиновых инвариантов для отыскания общего решения уравнения Дирака

Как известно, если пространство однородно, то кроме операторов импульса $\mathbf{p}$ и полного момента импульса $\mathbf{J}$, являющихся интегралами свободного движения, гамильтониан Дирака коммутирует и с другими векторными операторами, среди которых [12]

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \hat{\boldsymbol{\Omega}} \times \mathbf{p} \qquad (40)$$

— электрическая спиновая поляризация,

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \hat{\boldsymbol{\Sigma}} + \frac{\hat{\boldsymbol{\Gamma}} \times \mathbf{p}}{mc} \qquad (41)$$

— магнитная спиновая поляризация,

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}} = \hat{\boldsymbol{\Omega}} + \hat{\rho}_1 \frac{\mathbf{p}}{mc} \qquad (42)$$

— пространственная часть 4-псевдовектора поляризации спина. Введенные здесь матрицы, как и матрицы $\hat{\Gamma}_j$ $(j = x, y)$ в определении оператора $\hat{U}_{\perp}$ (8), суть произведения МД:

$$\hat{\Sigma}_j = -i\hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_l, \quad \hat{\Gamma}_j = i\hat{\alpha}_j\hat{\beta}, \quad \hat{\Omega}_j = -i\hat{\beta}\hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_l = \hat{\beta}\hat{\Sigma}_j,$$

$$\hat{\rho}_1 = -i\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z,$$

где $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ и $\hat{\beta}$ определены в (2) и входят в набор 16-ти (включая единичную) линейно независимых МД. В стандартном представлении

$$\hat{\boldsymbol{\Gamma}} = \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ i\hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{\Omega}} = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \\ 0 & -\hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \hat{I}_2 \\ \hat{I}_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

а МД $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ определена выше (см. (23)).

В присутствии потенциала часть инвариантов естественным образом пропадает. В нашем случае, когда $V(\mathbf{r}) = V(z)$, с гамильтонианом Дирака коммутируют и тем самым являются сохраняющимися величинами только следующие компоненты операторов (40)–(42):

$$\hat{\varepsilon}_z = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\mathbf{e}_z = \hbar\hat{\boldsymbol{\Omega}} \cdot (\mathbf{k}_{\perp} \times \mathbf{e}_z),$$

$$\hat{\mu}_z = \hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{e}_z = \hat{\boldsymbol{\Sigma}}\mathbf{e}_z + \frac{\hbar}{mc}\hat{\boldsymbol{\Gamma}} \cdot (\mathbf{k}_{\perp} \times \mathbf{e}_z),$$

$$\hat{\mathcal{S}}_x = \hat{\Omega}_x + \frac{\hbar k_x}{mc}\hat{\rho}_1, \quad \hat{\mathcal{S}}_y = \hat{\Omega}_y + \frac{\hbar k_y}{mc}\hat{\rho}_1, \qquad (44)$$

не содержащие оператора $\hat{p}_z$. Из равенств

$$\hat{\varepsilon}_z^2 = \hbar^2 k_{\perp}^2 \hat{I}, \quad \hat{\mu}_z^2 = \left(1 + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{m^2c^2}\right)\hat{I},$$

$$\hat{\mathcal{S}}_j^2 = \left(1 + \frac{\hbar^2 k_j^2}{m^2c^2}\right)\hat{I}, \; j = x, y$$

следует, что для функций вида (4) собственными значениями операторов (44) будут величины

$$\varepsilon_z = \sigma\hbar k_\perp, \quad \mu_z = \sigma\sqrt{1+\left(\frac{\hbar k_\perp}{mc}\right)^2}, \quad \mathcal{S}_j = \sigma\sqrt{1+\left(\frac{\hbar k_j}{mc}\right)^2},$$

где, как и выше, $\sigma = \pm 1$ — спиновое число.

Поскольку компоненты (44), коммутируя с оператором $\hat{H}_D(z)$ (см. (5)), не коммутируют между собой, система собственных функций этого гамильтониана может быть общей с какой-либо из этих компонент, что, как упоминалось, помогло решить систему (6) в трех разных случаях. Однако очевидно, что с гамильтонианом $\hat{H}_D(z)$ коммутирует и любая линейная комбинация операторов (44); в частности, в работе [9] в качестве таковой была выбрана проекция оператора $\hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}$ на произвольное направление $\mathbf{e}_\perp$ в плоскости xy, $\hat{\mathcal{S}}_\perp = \hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}\mathbf{e}_\perp$, т.е. линейная комбинация проекций $\hat{\mathcal{S}}_x$ и $\hat{\mathcal{S}}_y$. В общем же случае можно рассмотреть линейную комбинацию всех компонент (44) или ввести инвариантный оператор $\hat{\mathcal{I}}_{\text{inv}} = a_\varepsilon\hat{\varepsilon}_z + a_\mu\hat{\mu}_z + a_{\mathcal{S}}\hat{\mathcal{S}}_\perp$ с произвольными коэффициентами, удовлетворяющий условию $\hat{\mathcal{I}}_{\text{inv}}^2 = a^2\hat{I}$. Так как в данном случае оператор $\hat{\mathcal{I}}_{\text{inv}}$ не содержит операции дифференцирования, наличие такого инварианта способствует поиску решений системы (6).

В самом деле, задача на собственные значения инварианта сводится к системе алгебраических уравнений, допускающей точное решение, которое, очевидно, включает параметры a_j $(j = \varepsilon, \mu, \mathcal{S})$. В матричной форме эта система имеет вид

$$\hat{\mathcal{I}}_{\text{inv}}\Psi(z) = a\Psi(z), \tag{45}$$

причем ее решения задают структуру искомых собственных функций УД, а точнее, — компонент биспинора $\Psi(z)$,, сводя систему (6) к двум независимым, аналитическое решение которых находится сравнительно просто.

Применим с этой целью преобразование (8), переводящее, согласно (7), уравнение (45) в уравнение

$$\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_{\text{inv}}\tilde{\Psi}(z) = a\tilde{\Psi}(z) \tag{46}$$

для биспинора $\tilde{\Psi}(z)$ с матрицей $\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_{\text{inv}} = \hat{U}_\perp\hat{\mathcal{I}}_{\text{inv}}\hat{U}_\perp^\dagger$. Для входящих в преобразованную матрицу слагаемых получаем (см. Приложение)

$$\hat{\tilde{\epsilon}}_z = \hat{U}_\perp\hat{\epsilon}_z\hat{U}_\perp^\dagger = \hbar\left(\hat{\Omega}_x k_y - \hat{\Omega}_y k_x\right) = \hat{\epsilon}_z,$$

$$\hat{\tilde{\mu}}_z = \hat{U}_\perp\hat{\mu}_z\hat{U}_\perp^\dagger = \sqrt{1+\left(\frac{\hbar k_\perp}{mc}\right)^2}\hat{\Sigma}_z,$$

$$\hat{\tilde{\mathcal{S}}}_j = \hat{U}_\perp\hat{\mathcal{S}}_j\hat{U}_\perp^\dagger = \hat{\Omega}_j + \frac{\varepsilon_\perp - mc^2}{mc^2}\frac{k_j}{k_\perp}\hat{\boldsymbol{\Omega}}\mathbf{k}_\perp, \quad j = x, y,$$

из чего следует, что для УД (10) с потенциалом $V(z)$ инвариантом является линейная комбинация

$$\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_{\text{inv}} = \tilde{a}_x\hat{\Omega}_x + \tilde{a}_y\hat{\Omega}_y + \tilde{a}_z\hat{\Sigma}_z, \tag{47}$$

произвольные коэффициенты $\tilde{a}_j$ $(j = x, y, z)$ которой связаны с определяющими исходный инвариантный оператор $\hat{\mathcal{I}}_{\text{inv}}$ коэффициентами a_j $(j = \epsilon, \mu, \mathcal{S})$. В частности, из (47) следует, что собственные значения этого инварианта равны $\pm\sqrt{\tilde{a}_x^2 + \tilde{a}_y^2 + \tilde{a}_z^2} \equiv \sigma|a|$. Ввиду того, что последние играют вспомогательную роль, параметры $\tilde{a}_j$ без ограничения общности можно перенормировать заменой $\tilde{a}_j \Rightarrow \tilde{a}_j/|a|$ или положить $\sum_{j=x,y,z}\tilde{a}_j^2 = 1$, что позволяет сократить число независимых произвольных величин до двух путем параметризации

$$\tilde{a}_x = \sin\theta\cos\varphi, \quad \tilde{a}_y = \sin\theta\sin\varphi, \quad \tilde{a}_z = \cos\theta. \tag{48}$$

Тогда, принимая во внимание определения (23) и (43), преобразованный инвариант (47) приобретает блочно-диагональный вид:

$$\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_{\text{inv}} = \begin{pmatrix} \hat{\tilde{\mathcal{I}}}_u & 0 \\ 0 & \hat{\tilde{\mathcal{I}}}_d \end{pmatrix}, \tag{49}$$

в котором

$$\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_u = \begin{pmatrix} \cos\theta & \mathrm{e}^{-i\varphi}\sin\theta \\ \mathrm{e}^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix},$$

$$\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_d = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\mathrm{e}^{-i\varphi}\sin\theta \\ -\mathrm{e}^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}. \tag{50}$$

Оказывается, что диагонализация матрицы (49) осуществляется приведенным выше оператором (37), блоки $\hat{\omega}_u$ и $\hat{\omega}_d$ которого диагонализуют, соответственно, блоки $\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_u$ и $\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_d$ в (49):

$$\hat{\omega}_u^\dagger\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_u\hat{\omega}_u = \hat{\omega}_d^\dagger\hat{\tilde{\mathcal{I}}}_d\hat{\omega}_d = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_z.$$

Из этих соотношений следует, что с помощью оператора (37) инвариант (47) преобразуется к матрице $\hat{R}^\dagger\hat{\tilde{\mathcal{I}}}\hat{R} = \hat{\Sigma}_z$, собственными функциями которой являются биспиноры (38) с собственными значениями $\sigma = \pm 1$: $\hat{\Sigma}_z\tilde{\Psi}_\sigma(z|0) = \sigma\tilde{\Psi}_\sigma(z|0)$ и с двумя произвольными функциями $u_\sigma(z)$ и $v_\sigma(z)$.

Таким образом, опираясь на наличие инвариантов, также приходим к результату, полученному в предыдущем разделе: решением уравнения (46) будут биспиноры (36), а искомыми функциями уравнения (45) — биспиноры (39).

Биспинор (39) можно при этом тождественно переписать иначе:

$$\Psi_\sigma(z) = \hat{R}\hat{U}_{FW}^\dagger \tilde{\Psi}_\sigma(z\,|\,0), \tag{51}$$

где предположено, что (см. (8)) $\hat{U}_\perp$ содержит фиксированные операторы. В итоге, в матрицу полного преобразования $\hat{U}_{FW} = \hat{R}^\dagger \hat{U}_\perp \hat{R}$ вводятся спиновые параметры, что позволяет ее рассматривать как аналог (или обобщение) 2D преобразования Фолди–Вудхайзена, которое путем подбора было угадано при нахождении общего решения УД в работе [10].

Заметим, что при выполнении пространственных преобразований можно придерживаться двух подходов: в одном — активном — преобразуются векторы состояний (ψ-функции), а операторы остаются фиксированными; согласно второму — пассивному подходу — преобразуются наблюдаемые, вернее, соответствующие им операторы, а векторы гильбертова пространства сохраняют неизменность. Фактически здесь неявным образом просматривается аналогия с представлениями Шредингера и Гейзенберга, которые при решении задач квантовой механики, как известно, эквивалентны. И можно утверждать, что подход первого типа напрямую использовался в работе [9], а второго — в работе [10].

Используя в (39) (или в (51), что эквивалентно) явные выражения операторов преобразования (8), (37) с учетом (30) и (35), находим, что искомый биспинор $\Psi_\sigma(z)$ имеет вид:

$$\Psi_\sigma(z\,|\,\theta,\varphi) = A\begin{pmatrix} \hat{\omega}_u \psi_{u,\sigma}(z\,|\,0) \\ \hat{\omega}_d \psi_{d,\sigma}(z\,|\,0) \end{pmatrix}, \tag{52}$$

где A — нормировочная постоянная, а его верхний и нижний спиноры задаются действием соответственно матриц поворота $\hat{\omega}_u$ и $\hat{\omega}_d$ на спиноры

$$\psi_{u\sigma}(z\,|\,0) = u_\sigma(z)\chi_\sigma(0) - \eta v_\sigma(z)\chi_{-\sigma}(0), \tag{53}$$

$$\psi_{d\sigma}(z\,|\,0) = v_\sigma(z)\chi_\sigma(0) + \eta u_\sigma(z)\chi_{-\sigma}(0). \tag{54}$$

Здесь $\chi_\sigma(0)$ определены в (31), а также введены обозначения

$$\eta = \frac{\nu}{1+\sqrt{1+\nu^2}}, \quad \nu^2 = \frac{\hbar(k_\perp^2 - q^2)}{m^2c^2}, \tag{55}$$

$$q \equiv q(\theta,\varphi) = \sin\theta\left(k_x \sin\varphi - k_y \cos\varphi\right) = k_\perp \sin\theta \sin(\varphi - \varphi_\perp). \quad |q| \le k_\perp. \tag{56}$$

Биспинор (52), включающий величины (53)–(56), совпадает с общим решением УД, найденным в [10] с помощью постулированного, как отмечалось, унитарного преобразования $\hat{R}\hat{U}_{FW}^\dagger$, а в частных случаях — с решениями, полученными в [9].

Поскольку в биспиноре фигурируют лишь две зависящие от координаты функции, его подстановка в УД (5) редуцирует систему (6) к системе двух уравнений,

$$\begin{cases} -i\hbar c\sigma u'_\sigma + i\hbar c q u_\sigma = \left[E - V(z) + \varepsilon(q)\right] v_\sigma, \\ -i\hbar c\sigma v'_\sigma - i\hbar c q v_\sigma = \left[E - V(z) - \varepsilon(q)\right] u_\sigma, \end{cases} \tag{57}$$

в которых (ср. (21) и (9))

$$\varepsilon(q) = \sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2\left(\mathbf{k}_\perp^2 - q^2\right)} = \sqrt{\varepsilon_\perp^2(\mathbf{k}_\perp) - \hbar^2c^2q^2}. \tag{58}$$

Подчеркнем, что приведенное дисперсионное соотношение зависит не только от затравочного и сохраняющегося волнового вектора $\mathbf{k}_\perp$ но, будучи «трехмерным», от величины q (56). Ниже будет показано, что именно последняя вносит во многие наблюдаемые операторы зависимости как от спинового состояния (его квантового числа σ), так и от угловых переменных θ и φ.

6. Параболическая квантовая яма

Если в работах [9,10] анализировались решения УД для прямоугольной КЯ, то здесь в качестве примера описания квази-2D электронов рассмотрим их связанные состояния в асимметричной одномерной параболической КЯ шириной d_{QW} и с собственной частотой ω_{QW}. Заметим, что в настоящее время гетероструктуры с такой координатной зависимостью потенциала искусственно выращиваются для функциональных элементов спинтронных и оптоэлектронных приборов [14,15].

Зададим модельный потенциал в виде

$$V(z) = \begin{cases} V_L = V_{QW} + \mathcal{E}d_{QW}/2 & \text{при } z < -d_{QW}/2, \\ V_C(z) = \dfrac{1}{2}m\omega_{QW}^2 z^2 - \mathcal{E}z & \text{при } |z| \le d_{QW}/2, \\ V_R = V_{QW} - \mathcal{E}d_{QW}/2 & \text{при } z > d_{QW}/2, \end{cases} \tag{59}$$

где $V_{QW} = m\omega_{QW}^2 d_{QW}^2/8$ — высота симметричной КЯ при нулевом значении параметра $\mathcal{E}$, задающего ее асимметрию и удовлетворяющего неравенству $\mathcal{E}d_{QW}/2V_{QW} \ll 1$. Заметим, что параметром асимметрии может служить внешнее электрическое поле, направленное вдоль оси z. При этом, строго говоря, во внешних областях потенциал также зависит от z. Однако для связанных состояний, волновые функции которых экспоненциально спадают вне КЯ, такая зависимость при не слишком сильных полях практически не скажется на показателях затухания. В особенности это касается основного состояния в параболической КЯ, для которого, как будет видно, волновая функция будет экспоненциально малой еще до подхода к границам $z = \pm d_{QW}/2$.

Таким образом, пространство вдоль оси z разбивается на три области — левую L, центральную C и правую R, в каждой из которых потенциал принимает свое значение V_j ($j = L, C, R$). Очевидно, что в каждой из областей необходимо найти биспинорные волновые функции, а общая определяется выражением

$$\Psi(x,y,z) = \begin{cases} \Psi_L(x,y,z) & \text{при } z < -d_{QW}/2, \\ \Psi_C(x,y,z) & \text{при } |z| \le d_{QW}/2, \\ \Psi_R(x,y,z) & \text{при } z > d_{QW}/2, \end{cases} \quad (60)$$

причем на границах областей при $|z| = d_{QW}/2$ должны удовлетворяться условия непрерывности, что сводится к непрерывности биспинора Ψ_j в (4). Равенство биспиноров соответствует равенствам их компонент, что, согласно (52)–(54), сводится, в конечном итоге, к равенствам на функции u_σ и v_σ, удовлетворяющие системе (57).

Нас интересуют связанные состояниями электронов, захваченных потенциальной ямой (59), поэтому будем исследовать решения системы (57) для области $E > 0$. Более того, существенными в конденсированных средах являются состояния с нерелятивистскими энергиями, когда $V_{L,R} << mc^2$, или такие, которые, в свою очередь, удовлетворяют неравенству $\hbar^2 k_\perp^2 / 2m << mc^2$. Энергию E_b соответствующих связанных состояний за вычетом энергии покоя mc^2 будем отсчитывать от дна ямы. Тогда с учетом наложенных ограничений для энергий $E_b = E - mc^2 < V_R$ (однако $E_b > 0$) функции u_σ и v_σ в (57) оказываются большой и малой компонентами соответственно, а сама система двух уравнений первого порядка сведется к одному уравнению второго порядка для функции $u_\sigma(z)$, причем

$$v_\sigma(z) = -i \frac{\hbar c \sigma}{E + \varepsilon(q) - V_j} \left(u'_\sigma(z) - \sigma q u_\sigma(z) \right). \quad (61)$$

Рассмотрим сначала решение в наиболее актуальной центральной области КЯ. Умножив второе уравнение системы (57) на $E - V_C(z) + \varepsilon(q)$ и учтя первое, находим

$$-\hbar^2 c^2 u''_\sigma - i\hbar c \sigma V'_C(z) v_\sigma + \left[2E - V_C(z) \right] V_C(z) u_\sigma =$$

$$= \left[E^2 - \varepsilon_\perp^2(\mathbf{k}_\perp) \right] u_\sigma,$$

где $\varepsilon_\perp(\mathbf{k}_\perp)$ определено выражением (9). Принимая теперь во внимание малость отношений $V_j / mc^2 << 1$, достаточно считать, что справедливо приближение, когда $2E - V_C(z) \simeq 2mc^2$ и $E + \varepsilon(q) - V_C(z) \simeq 2mc^2$, что для $u_\sigma(z)$ дает уравнение

$$-\hbar^2 c^2 \left(u''_\sigma + \frac{1}{2mc^2} V'_C(z) u'_\sigma \right) +$$

$$+ 2mc^2 \left(V_C(z) + \frac{\hbar^2 \sigma q}{4m^2 c^2} V'_C(z) \right) u_\sigma =$$

$$= \left[E^2 - \varepsilon_\perp^2(\mathbf{k}_\perp) \right] u_\sigma, \quad (62)$$

которое благодаря подстановке

$$u_\sigma(z) = \mathrm{e}^{-\frac{V_C(z)}{4mc^2}} w_\sigma(z)$$

превращается в уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} w''_\sigma + \left(V_C(z) + \sigma q \lambda_{SO} V'_C(z) + \right.$$

$$\left. + \frac{\lambda_{SO}}{8mc^2} \left[V'_C(z) \right]^2 + \frac{\lambda_{SO}}{2} V''_C(z) \right) w_\sigma = \frac{E^2 - \varepsilon^2(\mathbf{k}_\perp)}{2mc^2} w_\sigma, \quad (63)$$

с размерной константой $\lambda_{SO} = \hbar^2 / 4m^2 c^2$, характеризующей величину СОВ. Используя явный вид $V(z)$ (59), в области C приходим к обычному уравнению

$$w''_\sigma(z) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_b - \frac{m\omega_{QW}^2}{2} \left(z - z_\sigma \right)^2 \right] w_\sigma(z) = 0 \quad (64)$$

для одномерного осциллятора, точка равновесия которого смещена относительно начала координат на величину

$$z_\sigma = \frac{\mathcal{E}}{m\omega_{QW}^2} - \sigma \lambda_{SO} q, \quad (65)$$

Здесь использовано введенное выше обозначение

$$E_b = \frac{E^2 - \varepsilon_\perp^2(\mathbf{k}_\perp)}{2mc^2} + \frac{\mathcal{E}^2}{2m\omega_{QW}^2} - \frac{m\omega_{QW}^2}{2} \lambda_{SO} \left(1 - \lambda_{SO} q^2 \right), \quad (66)$$

определяющее энергию связанных состояний. Как хорошо известно (см., например, [8,13]), решения уравнения (64) для бесконечно высокой параболической КЯ выражаются через полиномы Эрмита с дискретным спектром $E_b = \hbar\omega_{QW}(n + 1/2)$, где n — натуральные числа, начиная с $n = 0$, а последние два слагаемые в (66) определяют смещение уровней, вызванное электрическим полем и СОВ.

Упомянутый спектр является следствием нулевых граничных условий, накладываемых на волновую функцию при $|z| \to \infty$. Здесь же граничными условиями являются условия сшивки на границах КЯ, а решение в общем случае выражается через вырожденные гипергеометрические функции. Поэтому рассмотрим подробнее решение уравнения (64).

Для этого обезразмерим координату z, введя переменную

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_{QW}}{\hbar}} \left(z - z_\sigma \right). \quad (67)$$

Теперь, после подстановки $w_\sigma = \exp(-\xi^2/2) f(\xi)$, перейдем к уравнению

$$f'' - 2\xi f' + rf = 0, \quad r = e_b - 1, \quad e_b = \frac{2E_b}{\hbar\omega_{QW}}, \tag{68}$$

где штрихи обозначают дифференцирование по ξ. Решение этого уравнения будем искать в виде разложения $f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n$, которое приводит к равенству

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[(r-2n)c_n + (n+1)(n+2)c_{n+2} \right] \xi^n = 0,$$

откуда следует рекуррентное соотношение для коэффициентов c_n

$$c_{n+2} = -\frac{r-2n}{(n+1)(n+2)} c_n, \quad n = 0, 1, \ldots,$$

разделяющееся на две независимые серии для n четных, $n = 2j$, и нечетных, $n = 2j+1$ ($j = 0,1,\ldots$), и оставляющее произвольными два коэффициента — c_0 и c_1. Следовательно, имеется два линейно независимых решения уравнения (68):

$$\begin{aligned} f_+(\xi) &= \sum_{j=0}^{\infty} c_j^{(+)} \xi^{2j}, \quad c_{j+1}^{(+)} = -\frac{r-4j}{2(j+1)(2j+1)} c_j^{(+)}, \quad c_0^{(+)} = 1, \\ f_-(\xi) &= \sum_{j=0}^{\infty} c_j^{(-)} \xi^{2j+1}, \quad c_{j+1}^{(-)} = -\frac{r-2(2j+1)}{2(j+1)(2j+3)} c_j^{(-)}, \quad c_0^{(-)} = 1, \end{aligned} \tag{69}$$

где $f_+(\xi)$ и $f_-(\xi)$ являются четной и нечетной функциями ξ соответственно. Общим же решением будет $f_\sigma(\xi) = A_C^{(+)} f_+(\xi) + A_C^{(-)} f_-(\xi)$ с двумя произвольными константами, в котором зависимость от σ обеспечивается параметром сдвига z_σ (см. (65), (67)).

Таким образом, в центральной области решение уравнения (62) имеет вид

$$u_\sigma\left(|z| \le d_{QW}/2\right) = \mathrm{e}^{-\Phi_\sigma(z)} f_\sigma(\xi), \tag{70}$$

где (в главном по $1/c$ приближении)

$$\Phi_\sigma(z) \approx \frac{m\omega_{QW}}{2\hbar}(z - z_\sigma)^2. \tag{71}$$

В областях $|z| > d_{QW}/2$, где $V_j = \mathrm{const}$, решениями уравнений (57) при заданной энергии (66) будут экспоненциально убывающие в направлениях от КЯ функции

$$\begin{aligned} u_\sigma(z < -d_{QW}/2) &= A_L \exp\left[\kappa_L (z + d_{QW}/2)\right], \\ u_\sigma(z > d_{QW}/2) &= A_R \exp\left[-\kappa_R (z - d_{QW}/2)\right] \end{aligned} \tag{72}$$

с показателями пространственного затухания

$$\kappa_j \simeq \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_j - E_b)}, \quad j = L, R. \tag{73}$$

Как упоминалось, условие сшивки биспиноров в (60) сводится к равенствам на функции u_σ и v_σ на границах областей при $z = \pm d_{QW}/2$. Функции u_σ определены выражениями (70) и (72), а для функций $v_{\sigma,j}(z)$, согласно (61), получаем

$$\begin{aligned} v_\sigma(z < -d_{QW}/2) &= -i\frac{\hbar c\sigma}{E + \varepsilon(q) - V_L}(\kappa_L - \sigma q) u_\sigma(z < -d_{QW}/2), \\ v_\sigma(|z| \le d_{QW}) &= -i\frac{\hbar c\sigma}{E + \varepsilon(q) - V_C(z)}\left[\frac{df_\sigma}{dz} - \left(\frac{d\Phi}{dz} + \sigma q\right) f_\sigma\right] \mathrm{e}^{-\Phi_\sigma(z)}, \\ v_\sigma(z > d_{QW}/2) &= i\frac{\hbar c\sigma}{E + \varepsilon(q) - V_R}(\kappa_R + \sigma q) u_\sigma(z > d_{QW}/2). \end{aligned} \tag{74}$$

Определяя нормировочные коэффициенты A_L и A_R из условий сшивки функций u_σ и подставляя затем их в условия сшивки функций v_σ, приходим к системе равенств для таких же искомых коэффициентов $A_C^{(+)}$ и $A_C^{(-)}$:

$$\begin{aligned} \left[c_L f_+(\xi_L) + f_+'(\xi_L)\right] A_C^{(+)} + \left[c_L f_-(\xi_L) + f_-'(\xi_L)\right] A_C^{(-)} &= 0, \\ \left[c_R f_+(\xi_R) - f_+'(\xi_R)\right] A_C^{(+)} + \left[c_R f_-(\xi_R) - f_-'(\xi_R)\right] A_C^{(-)} &= 0, \end{aligned} \tag{75}$$

где введены обозначения

$$\xi_L = -\sqrt{\frac{m\omega_{QW}}{\hbar}}\left(\frac{d_{QW}}{2}+z_\sigma\right), \qquad \xi_R = \sqrt{\frac{m\omega_{QW}}{\hbar}}\left(\frac{d_{QW}}{2}-z_\sigma\right),$$
$$c_L = \sqrt{\frac{m\omega_{QW}}{\hbar}}\left(\frac{d_{QW}}{2}-\frac{\hbar\kappa_L}{m\omega_{QW}}+z_\sigma\right), \quad c_R = \sqrt{\frac{m\omega_{QW}}{\hbar}}\left(\frac{d_{QW}}{2}-\frac{\hbar\kappa_R}{m\omega_{QW}}-z_\sigma\right). \tag{76}$$

Условие существования нетривиального решения системы (75) требует равенства нулю детерминанта, составленного из коэффициентов при $A_C^{(\pm)}$. Это условие можно записать в виде

$$\frac{f_-'(\xi_L)f_+'(\xi_R)-f_+'(\xi_L)f_-'(\xi_R)}{f_+(\xi_L)f_-(\xi_R)-f_-(\xi_L)f_+(\xi_R)}+$$
$$+c_L\frac{f_-(\xi_L)f_+'(\xi_R)-f_+(\xi_L)f_-'(\xi_R)}{f_+(\xi_L)f_-(\xi_R)-f_-(\xi_L)f_+(\xi_R)}+$$
$$+c_R\frac{f_+'(\xi_L)f_-(\xi_R)-f_-'(\xi_L)f_+(\xi_R)}{f_+(\xi_L)f_-(\xi_R)-f_-(\xi_L)f_+(\xi_R)}+c_Lc_R=0, \tag{77}$$

а его корни определяют энергетический спектр КЯ.

Проанализируем качественно решение данного уравнения для основного состояния в случае достаточно глубокой ямы, для чего введем безразмерный параметр

$$v_{QW} = \sqrt{\frac{2V_{QW}}{\hbar\omega_{QW}}} = \sqrt{\frac{m\omega_{QW}d_{QW}^2}{4\hbar}}, \tag{78}$$

характеризующий глубину ямы, и будем полагать, что $v_{QW}^2 \gg 1$. Тогда с учетом неравенства $E_b/V_{QW} \ll 1$ в (73) выражения (76) можно записать в виде

$$\xi_L = -v_{QW}(1+\zeta_\sigma), \qquad \xi_R = v_{QW}(1-\zeta_\sigma),$$
$$c_L = \frac{1}{2v_{QW}}\left(e_b - 4v_{QW}^2\frac{\lambda_{SO}\sigma q}{d_{QW}}\right), \quad c_R = \frac{1}{2v_{QW}}\left(e_b + 4v_{QW}^2\frac{\lambda_{SO}\sigma q}{d_{QW}}\right), \tag{79}$$

где $\zeta_\sigma = 2z_\sigma/d_{QW}$, а e_b определено в (68).

Основному состоянию отвечает наименьший корень уравнения (77), отвечающий малым значениям r. В этом случае используем следующие аппроксимации для значений функций $f_\pm$ и их производных на границах областей:

$$f_+(\xi_R) = f_+(\xi_L) = F_+,$$
$$f_-(\xi_R) = v_{QW}(1-\zeta_\sigma)F_-, \quad f_-(\xi_L) = -v_{QW}(1+\zeta_\sigma)F_-,$$
$$f_+'(\xi_R) = -rv_{QW}(1-\zeta_\sigma)F_+', \quad f_+'(\xi_L) = rv_{QW}(1+\zeta_\sigma)F_+',$$
$$f_-'(\xi_R) = 1-\frac{r-2}{2}v_{QW}^2(1-\zeta_\sigma)^2F_-', \quad f_-'(\xi_L) = 1-\frac{r-2}{2}v_{QW}^2(1+\zeta_\sigma)^2F_-',$$

где

$$F_+ = \sum_{j=0}^{\infty}c_j^{(+)}v_{QW}^{2j}, \quad F_- = \sum_{j=0}^{\infty}c_j^{(-)}v_{QW}^{2j},$$
$$F_+' = \sum_{j=0}^{\infty}\left(c_{j+1}^{(+)}/c_1^{(+)}\right)v_{QW}^{2j}, \quad F_-' = \sum_{j=0}^{\infty}\left(c_{j+1}^{(-)}/c_1^{(-)}\right)v_{QW}^{2j} \tag{80}$$

и учтено, что $\zeta_\sigma \ll 1$.

Подставляя данные выражения в (77), ограничиваясь величинами порядка малости не выше v_{QW}^{-2} и полагая, что при $e_b \sim 1$ ($r \sim 0$) отношения $F_\pm/F_\pm'$ слабо зависят от r, а их величина ~ 1, приходим к уравнению

$$\left(1+\frac{3}{2}v_{QW}^{-2}\right)e_b^2 - 4\left(1-\frac{\lambda_{SO}\sigma q}{d_{QW}}\zeta_\sigma+\frac{5}{8}v_{QW}^{-2}\right)e_b +$$
$$+3\left(1-4\frac{\lambda_{SO}\sigma q}{d_{QW}}\zeta_\sigma-\frac{8}{3}\frac{\lambda_{SO}^2q^2}{d_{QW}^2}\right)=0,$$

наименьший корень которого

$$e_0 \simeq 1-\frac{1}{2}v_{QW}^{-2}-4\frac{\lambda_{SO}\sigma q}{d_{QW}}\zeta_\sigma-4\frac{\lambda_{SO}^2q^2}{d_{QW}^2} \tag{81}$$

определяет энергию основного ($n=0$) связанного состояния E_b. Дальнейшая подстановка выражения (81) в (66) дает закон дисперсии наинизшей зоны квази-2D электронов в параболической КЯ. В результате, согласно (66) и с учетом (56), собственное значение УД приобретает форму $E \simeq mc^2 + E_{0\sigma}(\mathbf{k}_\perp)$ с характерным для КЯ законом дисперсии

$$E_{0\sigma}(\mathbf{k}_\perp) = E_0(0) + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m^*(\varphi_\perp)} + \sigma\alpha(\varphi_\perp)k_\perp, \qquad (82)$$

где

$$E_0(0) \simeq \frac{1}{2}\hbar\omega_{QW}\left(1 - \frac{\hbar\omega_{QW}}{4V_{QW}} - \frac{(\mathcal{E}d_{QW})^2}{8\hbar\omega_{QW}V_{QW}}\right) \qquad (83)$$

— энергия основного состояния при значении $k_\perp = 0$, сдвинутая относительно энергии гармонического осциллятора вследствие конечной глубины ямы и внешнего поля;

$$m^*(\varphi_\perp) = \left[1 + \left(\frac{\hbar\omega_{QW}}{4mc^2}\right)^2 \sin^2\theta \sin^2(\varphi - \varphi_\perp)\right]m \quad (84)$$

— перенормированная СОВ эффективная масса электрона, а

$$\alpha(\varphi_\perp) = 4\frac{\hbar\lambda_{SO}\mathcal{E}}{m\omega_{QW}d_{QW}^2}\sin\theta\sin(\varphi - \varphi_\perp) \qquad (85)$$

— коэффициент, приводящий к анизотропному и зависящему от приложенного электрического поля $\mathcal{E}$ расщеплению спиновых подзон $\sigma = \pm 1$ в спектре квази-2D электронов, который тем самым допускает внешнее управление [4,6]. Для частного случая $\theta = \pi/2$, $\varphi = \varphi_\perp + \pi/2$ это расщепление совпадает с расщеплением Рашбы, а величина (85) при таких значениях углов обычно называется параметром Бычкова–Рашбы α_{BR} [4].

Необходимо подчеркнуть, что дисперсионное соотношение (82) качественно описывает энергетический спектр 2D электрона независимо от формы КЯ, и, например, для появления расщепления Рашбы единственным требованием является ее асимметричность. При этом важно иметь в виду, что во внешнем потенциале, который сохраняет свободное движение частиц в двух направлениях, ограничивая их перемещение лишь в третьем, ось квантования спина может принимать произвольное направление, определяемое свободными параметрами θ и φ. Ориентация спина при этом характеризуется вектором спиновой поляризации $\mathbf{S}_\sigma = \left\langle \Psi_\sigma | \hat{\boldsymbol{\Sigma}} | \Psi_\sigma \right\rangle$ в заданном спиновом состоянии. Так, в состоянии (52) этот вектор (в пренебрежении малыми вкладами)

$$\mathbf{S}_\sigma(z) = \left\langle \Psi_\sigma(z) | \hat{\boldsymbol{\Sigma}} | \Psi_\sigma(z) \right\rangle \approx$$

$$\approx |u_\sigma(z)|^2 \langle \chi_\sigma(\theta,\phi) | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \chi_\sigma(\theta,\varphi) \rangle, \qquad (86)$$

где спиноры $\chi_\sigma(\theta,\varphi)$ заданы выражениями (26) и являются собственными только того или иного из спиновых инвариантов.

Действительно, как следует из выражения (82), спектр 2D электрона зависит от ориентации спина относительно двух направлений — волнового вектора $\mathbf{k}_\perp$ и градиента потенциала (в рассматриваемом случае $\mathbf{e}_z$). В состоянии с определенным значением z-компоненты магнитной спиновой поляризации $\hat{\mu}_z$ угол $\theta = 0$, $\mathbf{S}_\sigma \parallel \mathbf{e}_z$ и спектр оказывается вырожденным по спину. Наоборот, в состоянии с определенным значением z-компоненты электрической спиновой поляризации $\hat{\varepsilon}_z$, когда $\theta = \pi/2$ и $\varphi = \varphi_\perp + \pi/2$, спины лежат в плоскости слоя, будучи ортогональны как градиенту потенциала, так и волновому вектору, что, как упоминалось, отвечает случаю Рашбы с изотропным в $k_x k_y$-плоскости спиновым расщеплением зон. Наконец, в состоянии, отвечающем инварианту $\hat{\mathcal{S}}_\perp$ (здесь $\theta = \pi/2$, $\varphi = \varphi_0$), спиновое расщепление и сам спектр становятся анизотропными в $k_x k_y$-плоскости. Другими словами, с точки зрения спин-орбитального расщепления два из трех приведенных спиновых состояний отличаются от его стандартного «рашбовского» проявления, что, несомненно, должно иметь экспериментальные следствия.

Интересным является также распределение электронов в слое, которое сигнализирует о появлении спинового эффекта Холла [16]. В частности, с помощью явного вида функции (70) нетрудно убедиться, что для параболической КЯ

$$\mathbf{S}_\sigma(z) \sim |u_\sigma(z)|^2 \sim \exp\left\{-\frac{m\omega_{QW}}{\hbar}(z - \sigma\lambda_{SO}q)^2\right\}.$$

Отсюда неизбежно следует асимметричное распределение носителей вдоль координаты z в зависимости от знака σ. Это также может быть проверено в эксперименте именно для случая параболических КЯ, где спиновый эффект Холла выражен наиболее ярко.

Отметим также, что соответствующие корням $E_{n\sigma}(\mathbf{k}_\perp)$ уравнения (77) собственные функции $u_{n\sigma}(z)$ (70) (являющиеся фактически нерелятивистскими волновыми функциями) содержат вклады от четных f_+ и нечетных f_- функций. Это приводит к выводу, имеющему экспериментальное подтверждение [14], что в параболической КЯ разрешаются межзонные переходы, запрещенные правилами отбора по четности для чисто осцилляторных зон. При этом СОВ также вносит вклад в вероятность таких переходов.

7. Заключительные замечания

Выше, исходя из фундаментального УД, было убедительно продемонстрировано, как применительно к задачам физики конденсированных сред из его решений возникают не одна, а различные поправки, несущие смысл СОВ, а также приводящие к спиновому эффекту Холла, которые проанализированы на примере гетероструктур с параболическим профилем потенциала. Но более существенным, как нам представляется, является другой, возможно, непрямой, результат работы: используемое в нерелятивистской физике СОВ известного вида, из которого следует, в частности, СОВ Рашбы, не может считаться универсальным, а следовательно, единственным, так как не учитывает всех имеющихся собственных спиновых решений УД, что, в свою очередь, ограничивает и поиски новых экспериментальных проявлений СОВ, которые никак нельзя исключить. Тем самым мы приходим к необходимости пересмотра получения (или нового вывода) нерелятивистских поправок порядка $1/c$, а также $1/c^2$ к гамильтониану Шредингера, т.е., другими словами, к необходимости определения формы СОВ, которая бы последовательно включала наличие всех таких собственных спиновых состояний УД.

Чтобы пояснить о чем речь, напомним, что в нерелятивистском приближении с удержанием членов не выше $1/c^2$ УД переходит в приближенное уравнение [7,8]

$$\left[\frac{p^2}{2m}+V(\mathbf{r})+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\nabla V\times\mathbf{p}\right)+\right.$$
$$\left.+\ \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V-\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}\right]\psi=E\psi \qquad (87)$$

для спинорной (двухкомпонентной) волновой функции ψ, в котором третье слагаемое в левой части получило название «спин-орбитального взаимодействия» и, как считается, является оператором СОВ общего вида.

Тем не менее интересно отметить, что уже в одном из первых исследований СОВ в полупроводниках — пионерской работе Рашбы и Шеки* [17] — был поставлен вопрос, а при каких условиях закон дисперсии для электронов, полученный из уравнения (87), совпадает с их дисперсией, которая следует из УД. По сути ответ на него дают результаты, изложенные выше и касающиеся квази-2D систем.

При этом было подчеркнуто, что хотя в исходном УД отсутствует специальное слагаемое, отвечающее за СОВ, его решение по отношению к спиновой степени свободы заметно богаче, чем решение уравнения (87), следствием которого для квази-2D случая является только результат Рашбы. При получении уравнения (87) не сыграли своей роли не коммутирующие друг с другом спиновые инварианты, непосредственное использование которых приводит к выбору конкретного спинового базиса, а следовательно, и к наполнению смыслом спинового квантового числа в зависимости от того, какой из инвариантов имеет определенное значение. В результате, мы выяснили, что лишь в состоянии с определенным значением оператора $\hat{\varepsilon}_z$ (см. (44)) спектр квази-2D электронов повторяет спектр Рашбы и отличается от него в других случаях. Иными словами, квази-2D электроны проявляют спиновую лабильность, или способность изменять спиновое состояние в зависимости от предполагаемых условий.

Тот факт, что уравнение (87) сохраняет решение, отвечающее только инварианту $\hat{\varepsilon}_z$, имеет достаточно простое объяснение, опирающееся на способ перехода от УД к нерелятивистскому уравнению (87) путем использования преобразования Фолди–Вудхайзена. Если для свободного УД это преобразование является точным, то при наличии внешних полей его можно осуществить лишь приближенно, используя разложение по степеням $1/c$. При этом, как показывают прямые расчеты, лишь оператор $\hat{\varepsilon}_z$ остается инвариантным относиельно преобразования Фолди–Вудхайзена, в то время как операторы $\hat{\mu}_z$ и $\hat{\mathcal{S}}_j$ (см. (44)), как и сам гамильтониан Дирака, становятся блочно-диагональными лишь с заданной точностью по степеням $1/c$. Это свидетельствует, что оператор $\hat{\epsilon}_z$ остается инвариантом уравнения (87), а остальные являются таковыми лишь приближенно — их коммутаторы с гамильтонианом пропорциональны величинам, превышающим заданную малость [18]. Как показано в этой работе одним из авторов, исходя из факта приближенности уравнения (87) и решая его приближенно с сохранением релятивистских поправок, не превышающих $\sim(1/c)^2$, можно получить решения, отвечающие всем решениям УД, хотя регулярная математическая процедура пока не разработана.

В то же время ее поиск особенно актуален теперь в связи с интенсивным изучением так называемых релятивистски-подобных как низкоразмерных кристаллических систем — графена, силицена, борофена и т.п., так и их трехмерных аналогов — топологических диэлектриков, включая вейлевские полуметаллы. Более того, можно предвидеть и некоторые (скорее, количественные, но, тем не менее, важные) отличия, состоящие в том, что в наших расчетах мы предполагали конечность массы квазичастиц, в то время как в трехмерных релятивистски-подобных средах они безмассовые, что может отразиться на конкретном выражении для СОВ, могущем появиться в нерелятивистском уравнении Шредингера. Возможно, для этого потребуется использование не стандартного, а другого представления для МД.

Хотим выразить признательность Э.Й. Рашбе за ознакомление с некоторыми результатами работы и полезные вопросы. Работа выполнена в рамках Целевой программы фундаментальных исследований Отделения физики и астрономии НАН Украины.

* Английский перевод этой статьи доступен как приложение к обзору [6].

Приложение. Преобразования матриц Дирака

При расчетах использовались унитарные операторы преобразований (8) и (14), являющиеся, по сути, операторами Фолди–Вудхайзена, которые в общем случае имеют вид

$$\hat{U}_{\Gamma} = \exp\left\{ i\frac{\vartheta}{2}\mathbf{e}\hat{\mathbf{\Gamma}} \right\} = \cos\frac{\vartheta}{2}\hat{I} + i\sin\frac{\vartheta}{2}\mathbf{e}\hat{\mathbf{\Gamma}},$$

$$\mathbf{e} = \sum_{j=x,y,z} \gamma_j \mathbf{e}_j, \quad \mathbf{e}^2 = 1. \qquad (\text{П.1})$$

Результат действия этого преобразования на матрицы (2), (23) и введенные (43) вычисляется с использованием алгебры МД. Например,

$$\hat{\alpha}_j\hat{\Gamma}_k = -\hat{\Omega}_l, \hat{\alpha}_j\hat{\Gamma}_j = i\hat{\beta}, \hat{\Gamma}_j\hat{\Gamma}_k = i\hat{\Sigma}_l,$$

$$\hat{\Gamma}_j\hat{\Omega}_k = -\hat{\alpha}_l, \hat{\Gamma}_j\hat{\Omega}_j = i\hat{\rho}_1,$$

где $j = x, y, z$, а тройка j, k, l — любая циклическая перестановка x, y, z.

Приведем результат преобразования (П.1) МД, входящих в инварианты (44):

$$\hat{U}_{\Gamma}\hat{\rho}_1\hat{U}_{\Gamma}^{\dagger} = \cos\vartheta\hat{\rho}_1 + \sin\vartheta\mathbf{e}\hat{\mathbf{\Omega}}, \qquad (\text{П.2})$$

$$\hat{U}_{\Gamma}\hat{\beta}\hat{U}_{\Gamma}^{\dagger} = \cos\vartheta\hat{\beta} - \sin\vartheta\mathbf{e}\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \qquad (\text{П.3})$$

$$\hat{U}_{\Gamma}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{a}\hat{U}_{\Gamma}^{\dagger} = \left[\mathbf{a} - \mathbf{e}(\mathbf{ae})2\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right]\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \sin\vartheta(\mathbf{ae})\hat{\beta}, \qquad (\text{П.4})$$

$$\hat{U}_{\Gamma}\hat{\mathbf{\Gamma}}\mathbf{a}\hat{U}_{\Gamma}^{\dagger} = \left[\mathbf{a}\cos\vartheta + \mathbf{e}(\mathbf{ae})2\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right]\hat{\mathbf{\Gamma}} + \sin\vartheta\hat{\mathbf{\Sigma}}(\mathbf{a}\times\mathbf{e}), \qquad (\text{П.5})$$

$$\hat{U}_{\Gamma}\hat{\mathbf{\Sigma}}\mathbf{a}\hat{U}_{\Gamma}^{\dagger} = \left[\mathbf{a}\cos\vartheta + \mathbf{e}(\mathbf{ae})2\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right]\hat{\mathbf{\Sigma}} + \sin\vartheta\hat{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{a}\times\mathbf{e}), \qquad (\text{П.6})$$

$$\hat{U}_{\Gamma}\hat{\mathbf{\Omega}}\mathbf{a}\hat{U}_{\Gamma}^{\dagger} = \left[\mathbf{a} - \mathbf{e}(\mathbf{ae})2\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right]\hat{\mathbf{\Omega}} - \sin\vartheta(\mathbf{ae})\hat{\rho}_1. \qquad (\text{П.7})$$

Используя в формулах (П.1)–(П.7) $\mathbf{e} = \mathbf{k}_{\perp}/k_{\perp}$ и $\mathrm{tg}\,\vartheta = \hbar k_{\perp}/mc$, что соответствует матрице (8), а в качестве вектора $\mathbf{a}$ согласно (44) подставим в соответствующие выражения $\mathbf{k}_{\perp}\times\mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}_z$ либо $\mathbf{e}_{\perp}$, получим результат, приводящий к (47).

1. Э.И. Рашба, *ФТТ* **2**, 1224 (1960) [*Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960)].
2. Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба, *Письма ЖЭТФ* **39**, 66 (1984). [*Sov. Phys. JETP Lett*. **39**, 78 (1984)].
3. R.A. Deine, *Spintronics*, Utrecht University, Utrecht (2007), p. 67.
4. J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. Zutic, *Acta Phys. Slov*. **57**, 565 (2007).
5. А.М. Погорілий, С.М. Рябченко, О.І. Толстолиткін. *УФЖ* **6**, 37 (2010).
6. G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, *New J. Phys*. **17**, 050202 (2015).
7. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Релятивистская квантовая теория, часть* I, Наука, Москва (1968).
8. О.С. Давидов, *Квантова механіка*, Видавничий дім Академперіодика, Київ (2012).
9. A. Eremko, L. Brizhik, and V. Loktev, *Ann. Phys*. **361**, 423 (2015).
10. A. Eremko, L. Brizhik, and V. Loktev, *Ann. Phys.* **369**, 85 (2016).
11. D.B. Melrose and A.I. Parle, *Aust. J. Phys*. **36**, 755 (1983).
12. А.А. Соколов, И.М. Тернов. *Релятивистский электрон*, Наука, Москва (1974).
13. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Физматгиз, Москва (1963).
14. R.C. Miller, A.C. Gossard, D.A. Kleinman, and O. Munteanu, *Phys. Rev. B* **29**, 3740 (1984).
15. R.C. Myers, K.C. Ku, X. Li, N. Samarth, and D.D. Awschalom, *Phys. Rev. B* **72**, 041302(R) (2005).
16. J. Sinova, S.O. Valenzuela, J. Wunderlich, C.H. Back, and T. Jungwirth, *Rev. Mod. Phys*. **87**, 1213 (2015).
17. Э.И. Рашба, В.И. Шека, *Физика твердого тела. Сборник статей* II, Изд-во АН СССР, Москва-Ленинград (1959), с. 162.
18. О.О. Єремко, *Доповіді НАН України* № 4, 65 (2015).

On the theory of eigen spin states and spin-orbit interaction for quasi-two-dimensional electrons

A.A. Eremko and V.M. Loktev

The problem about Dirac electrons in quasi-two-dimensional space (for instance, interfaces, heterostructures, surfaces) is analytically solved. It is shown that for Dirac equation solution the unitary transformation method and spin invariants method give the identical results. The eigen bispinors of Dirac equation are found and it is demonstrated how it is appeared their variety what provided by the arbitrariness of the spin moment quantization axis direction. The peculiarities of behavior of the electrons in parabolic quantum well are considered.

PACS: 03.65.Pm Relativistic wave equation;
71.70.Ej Spin-orbit coupling;
73.21.Fg Quantum wells
73.22.Dj Single particle states/

Keywords: Dirac equation, spin states, spin-orbit interaction, Rashba splitting, spin-Hall effect.