ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
Т. 57, № 4 ФИЗИКА 2014

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 539.293.011

Г.Ф. КАРАВАЕВ

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ В ТЕОРИИ НАНОСТРУКТУР

На примере простой, точно решаемой модели потенциальной ямы, сформированной тремя кусочно-постоянными потенциалами, показано, что спиновое расщепление электронных уровней (эффект Рашбы) существует лишь при приближенном описании в рамках уравнения Паули. Точное решение задачи на основе уравнения Дирака показывает, что такого расщепления уровней в потенциальной яме нет. Этот результат получен как аналитически, так и численно. Показано, что он справедлив для произвольных систем кусочно-постоянных потенциалов, формирующих потенциальную яму.

Ключевые слова: *гетероструктура, уравнение Дирака, условия сшивания, квантовая яма, уровень энергии, спиновое расщепление.*

Полупроводниковые наноструктуры привлекают большой интерес в связи с обсуждаемыми перспективами их использования в электронике. Особый интерес вызывают спиновые свойства носителей заряда, управление которыми открывает возможности использования их в создании, например, квантовых компьютеров. Эти свойства описываются в одночастичном приближении уравнением Дирака, которое упрощается до уравнения Паули, содержащего релятивистские поправки к уравнению Шредингера. Весьма широко и детально исследуются механизмы взаимодействия спиновых и орбитальных степеней свободы. Среди них основное внимание обращается на взаимодействия, описываемые в моделях Дрессельхауза и Рашба. Оба они обусловлены релятивистскими поправками и рассматриваются чаще всего в приближении огибающих функций, применяемом для гетероструктур. При этом, насколько нам известно, другие релятивистские вклады не учитываются. Это пренебрежение другими вкладами оправдано в случае объемных кристаллов тем, что они приводят к малым поправкам, качественно не изменяющим рассчитываемого спектра энергий, в отличие от спин-орбитального взаимодействия, которое приводит к расщеплению уровней. Однако в случае гетероструктур требуется более тщательный анализ релятивистских эффектов. Рассчитываемые поправки малы и поэтому не следует одни из них учитывать, а другие не учитывать без должного обоснования. Другим важным фактором в построении адекватной теории является описание гетерограниц и формулировка подходящих граничных условий для огибающих функций. В настоящее время в приближении резких гетерограниц широко распространенным является выбор требования непрерывности огибающих функций и тот или иной выбор условий сшивания производных от огибающих функций (оправдываемый авторами требованием непрерывности плотности потока вероятности, выраженного через огибающие функции). Очевидно, что такой выбор нарушает непрерывность точной электронной плотности и плотности потока вероятности, поскольку гетерограница образована разными материалами с разными объемными энергетическими уровнями и разными волновыми функциями. Более того, оказывается, что и функция (спинор), удовлетворяющая уравнению Паули, испытывает разрыв на резкой гетерогранице, и его роль должна быть рассмотрена.

Уравнения Дирака и Паули в гетероструктурах

Уравнения Дирака и Паули рассматриваются во многих учебниках и монографиях [1, 2]. Для наших целей достаточно кратко повторить основные моменты этого анализа. Будем следовать работе [1] в выборе обозначений. Уравнения Дирака для спиноров φ, χ при наличии внешних полей (векторный и скалярный потенциалы $\boldsymbol{A}, V$) имеют вид

$$(i\hbar\partial_t - V)\varphi = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi, \quad (i\hbar\partial_t - V + 2mc^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi. \tag{1}$$

Здесь $\hbar$ – постоянная Планка; e и m – заряд и масса электрона; c – скорость света; t – время, $\boldsymbol{p} = -i\hbar\nabla$; $\boldsymbol{\sigma}$ – вектор матриц Паули; точка означает скалярное произведение векторов. Для стационарного решения с энергией ε (которая отсчитывается от значения mc^2, что видно из записи уравнений Дирака) второе уравнение системы (1) дает

$$\chi = \frac{c}{2mc^2 + \varepsilon - V}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi = \frac{c\mu}{2mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi, \quad \mu = \left(1 + \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)^{-1}. \tag{2}$$

Подставляя его в первое уравнение, получаем точное уравнение для спинора φ

$$(\varepsilon - V)\varphi = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\frac{c\mu}{2mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi. \tag{3}$$

Приближенное уравнение для спинора φ

$$\frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi = (\varepsilon - V)\varphi \tag{4}$$

получается при разложении μ в правой части (3) по малой величине $\frac{\varepsilon - V}{2mc^2}$. В этом разложении оставляем члены, пропорциональные c^{-2}. Далее для упрощения формул будем рассматривать случай $A = 0$. Переходя, согласно [1], от спинора φ к спинору Ψ, определяемому соотношением

$$\varphi = \left(1 - \frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\Psi, \tag{5}$$

и применяя к приближенному уравнению (4) оператор $\left(1 - \frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)$, получаем известное уравнение Паули для спинора Ψ

$$\frac{p^2}{2m}\Psi + V\Psi - \frac{p^4}{8m^3c^2}\Psi + \frac{\hbar^2(\Delta V)}{8m^2c^2}\Psi + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\nabla V), \boldsymbol{p}]\right)\Psi = \varepsilon\Psi. \tag{6}$$

Здесь третий член слева от знака равенства представляет поправку к кинетической энергии, связанную с зависимостью массы электрона от скорости, четвертый член есть дарвиновская поправка к потенциальной энергии, пятый член – спин-орбитальное взаимодействие (квадратные скобки означают векторное произведение). Остальные члены в (6) представляют слагаемые уравнения Шредингера. В точной дираковской постановке задачи плотность вероятности определяется формулой

$$\rho = \varphi^*\varphi + \chi^*\chi, \tag{7}$$

которая при учете связи спиноров (2) выражается через спинор φ:

$$\rho = \varphi^*\varphi + \frac{\mu}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi)^*(\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi). \tag{8}$$

Подставим φ из (5) в выражение для плотности. При этом во втором слагаемом достаточно подставить Ψ (с компонентами Ψ_1, Ψ_2) вместо φ и ограничиться главным членом. В итоге получаем с точностью до членов, пропорциональных c^{-2}:

$$\rho = \begin{pmatrix}\Psi_1^*, & \Psi_2^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2\begin{pmatrix}\Psi_1^*, & \Psi_2^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} - i\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\nabla\begin{pmatrix}\Psi_1^*, & \Psi_2^*\end{pmatrix}\cdot[\sigma,\nabla]\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}\right). \tag{9}$$

Поскольку в (9) второй и третий члены справа от знака равенства имеют вид дивергенции, при интегрировании величины ρ по некоторому объему два последних слагаемых в (9) сводятся к релятивистски малому поверхностному интегралу, а первый дает объемный вклад.

Плотность потока в точной дираковской форме имеет вид

$$j = c(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\chi + \chi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi). \tag{10}$$

В приближении с учетом поправок $\sim \frac{1}{c^2}$ из (2) имеем

$$\rho = \varphi^* \varphi + \frac{\mu}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi)^*(\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi)\,. \tag{11}$$

Подстановка приближенного значения χ в выражение для потока и использование легко проверяемых соотношений $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{a} + i[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{a}]$, $\boldsymbol{\sigma}(\sigma\cdot\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{a} + i[\boldsymbol{a},\boldsymbol{\sigma}]$ дает

$$\boldsymbol{j} = \frac{1}{2m}\left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)\left(\varphi^*\boldsymbol{p}\varphi + (\boldsymbol{p}\varphi)^*\varphi + \hbar\,\mathrm{rot}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi)\right). \tag{12}$$

В пренебрежении релятивистскими поправками этот результат совпадает с выражением для потока в [3] для случая $A = 0$. Теперь необходимо выразить плотность потока с помощью спинора Ψ (см. (5).) После ряда преобразований выражение для $\boldsymbol{j}$ принимает вид

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j} = \frac{1}{2m}\left(\Psi^*\boldsymbol{p}\Psi + (\boldsymbol{p}\Psi)^*\Psi + \hbar\,\mathrm{rot}(\Psi^*\boldsymbol{\sigma}\Psi)\right) - \frac{\hbar}{4m^2c^2}\Psi^*[(\nabla V),\boldsymbol{\sigma}]\Psi + \Psi^*\boldsymbol{p}\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^3c^2}\right)\Psi + \\ + \left(\boldsymbol{p}\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^3c^2}\right)\Psi\right)^*\Psi + \hbar\,\mathrm{rot}\left(\Psi^*\boldsymbol{\sigma}\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^3c^2}\right)\Psi\right) + \hbar\,\mathrm{rot}\left(\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^3c^2}\Psi\right)^*\boldsymbol{\sigma}\Psi\right).\end{aligned} \tag{13}$$

Выражение (13) содержит члены, определяемые коммутатором гамильтониана Паули с координатой, а также члены вихревой природы, связанные со спином. Заметим, что релятивистские поправки к $\boldsymbol{j}$ за счет этих членов такого же порядка, как и за счет спин-орбитального взаимодействия. Действительно, воспользуемся соотношением $\frac{p^2}{2m}\Psi = (\varepsilon - V)\Psi$, справедливым в пренебрежении релятивистскими поправками в уравнении Паули, для оценки двух последних вкладов в формуле (13). Их сумма равна

$$-\frac{\hbar}{2m^2c^2}[\nabla, \Psi^*(\varepsilon - V)\boldsymbol{\sigma}\Psi] = -\frac{\hbar(\varepsilon - V)}{2m^2c^2}\mathrm{rot}(\Psi^*\boldsymbol{\sigma}\Psi) + \frac{\hbar}{2m^2c^2}\Psi^*[(\nabla V),\boldsymbol{\sigma}]\Psi\,.$$

Здесь последний член справа от знака равенства вдвое больше спин-орбитального вклада и имеет противоположный знак. Это означает, что при использовании уравнения Паули для описания спиновых эффектов следует внимательно учитывать все слагаемые одного порядка малости. Такой вывод подтверждается также при анализе условий сшивания спиноров в случае изучения систем с разрывными потенциалами.

Рассмотрим структуру, составленную из двух разных материалов, и предположим, что плоскость их контакта перпендикулярна оси z ($z = z_0$). Решать систему уравнений будем в отдельности для каждого материала, а затем сшивать решения. В качестве условий на границе примем равенство входящих в уравнения Дирака спиноров (верхний индекс у спиноров φ и нижний индекс у потенциалов V здесь и ниже указывает номер материала)

$$\varphi^1(x,y,z_0) = \varphi^2(x,y,z_0);\quad \mu_1(p_z - i[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{p}]_z)\varphi^1 = \mu_2\,(p_z - i[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{p}]_z)\varphi^2,\ \mu_j = \left(1 + \frac{\varepsilon - V_j}{2mc^2}\right)^{-1},\ j = 1, 2. \tag{14}$$

Во втором условии сшивания спиноров опущены аргументы x, y, z_0, а одинаковые множители $1/2mc$ сокращены. Выписанные точные условия обеспечивают непрерывность плотности вероятности и плотности ее потока. Всего, таким образом, на границе мы имеем четыре условия (они зависят от координат x, y), которых должно быть достаточно для отыскания решения уравнений.

Приближенное решение для спинора χ дается формулой (11). Поэтому условие непрерывности этого спинора принимает вид

$$\left(1 - \frac{\varepsilon - V_1}{2mc^2}\right)(p_z - i[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{p}]_z)\varphi^1\Big|_{z=z_0} = \left(1 - \frac{\varepsilon - V_2}{2mc^2}\right)(p_z - i[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{p}]_z)\varphi^2\Big|_{z=z_0}\,. \tag{15}$$

Для определенных в (5) спиноров Ψ условия сшивания

$$\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\Psi^1\Big|_{z=z_0}=\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\Psi^2\Big|_{z=z_0}; \tag{16}$$

$$\left(1-\frac{\varepsilon-V_1}{2mc^2}\right)(p_z+i[\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}]_z)\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\Psi^1\Big|_{z=z_0}=\left(1-\frac{\varepsilon-V_2}{2mc^2}\right)(p_z+i[\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}]_z)\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\Psi^2\Big|_{z=z_0} \tag{17}$$

рассмотрим подробнее.

В граничные условия (16), (17) входят вторые производные от спиноров. Однако они сопровождаются малыми сомножителями порядка c^{-2}, поэтому их можно аппроксимировать приближенным выражением $\frac{p^2}{2m}\Psi=(\varepsilon-V)\Psi$, справедливым в нерелятивистском приближении. Тогда система условий сшивания, при отбрасывании членов порядка c^{-4} и меньше, приобретает более наглядный вид

$$\left(1-\frac{\varepsilon-V_1}{4mc^2}\right)\Psi^1\Big|_{z=z_0}=\left(1-\frac{\varepsilon-V_2}{4mc^2}\right)\Psi^2\Big|_{z=z_0}, \tag{18}$$

$$\begin{aligned}&\left(\left(1-3\frac{\varepsilon-V_1}{4mc^2}\right)p_z+\frac{(p_zV_1)}{4mc^2}\right)\Psi^1\Big|_{z=z_0}+\frac{V_1}{2mc^2}i[\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}]_z\,\Psi^1\Big|_{z=z_0}=\\&=\left(\left(1-3\frac{\varepsilon-V_2}{4mc^2}\right)p_z+\frac{(p_zV_2)}{4mc^2}\right)\Psi^2\Big|_{z=z_0}+\frac{V_2}{2mc^2}i[\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}]_z\,\Psi^2\Big|_{z=z_0}.\end{aligned} \tag{19}$$

На гетерогранице спиноры, удовлетворяющие уравнению Паули, испытывают разрыв, обусловленный разрывом потенциала. Производные спиноров также испытывают разрыв, обусловленный разрывом потенциала и его первой производной. Заметим, что разрыв первой производной от потенциала может оказаться существенным в материалах с большой пьезо- и спонтанной поляризацией.

В большинстве работ, посвященных изучению спиновых явлений в гетероструктурах, в уравнении Паули из релятивистских поправок учитывается только спин-орбитальное взаимодействие [4, 5]. Выше было показано, что это некорректно. Зачастую исследования проводятся в рамках приближения огибающих функций и при этом на соответствующих гетерограницах спиноры считаются непрерывными, а условия сшивания производных выбираются так, чтобы обеспечить непрерывность плотности потока вероятности, которая также вычисляется неточно. Разрыв огибающих функций и их производных обязательно возникает при приближенном решении задачи, когда блоховские волновые функции электронов в контактирующих кристаллах различаются [6]. Огибающие функции в этом отношении не уникальны. Такой разрыв возникает и при приближенном решении уравнения Дирака, т.е. при анализе уравнения Паули.

Рассмотрим анализ уравнения Паули, проведенный аналогично уравнению Шредингера. Чаще всего предполагается, что спинор, подчиняющийся уравнению Паули, является непрерывным на гетерогранице

$$\Psi^1\Big|_{z=z_0}=\Psi^2\Big|_{z=z_0}. \tag{20}$$

Второе условие сшивания получается путем интегрирования уравнения Паули по малому интервалу оси z, включающему границу между материалами:

$$\begin{aligned}&\left(\left(1-\frac{\varepsilon-V_1}{2mc^2}\right)p_z+\frac{(p_zV_1)}{4mc^2}\right)\Psi^1\Big|_{z=z_0}+\frac{V_1}{2mc^2}i[\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}]_z\cdot\Psi^1\Big|_{z=z_0}=\\&=\left(\left(1-\frac{\varepsilon-V_2}{2mc^2}\right)p_z+\frac{(p_zV_2)}{4mc^2}\right)\Psi^2\Big|_{z=z_0}+\frac{V_2}{2mc^2}i[\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}]_z\cdot\Psi^2\Big|_{z=z_0}.\end{aligned} \tag{21}$$

Как видно, условия (20), (21) отличаются от (18), (19) некоторыми числовыми множителями. Если принять часто используемое отбрасывание всех релятивистских поправок в уравнении Паули,

кроме спин-орбитального взаимодействия, то традиционные условия сшивания получаются из (20), (21) при замене больших круглых скобок на p_z. Представляет интерес сравнение результатов использования четырех разных вариантов описания релятивистских эффектов на примере простой системы: 1) точное решение уравнения Дирака с точными условиями (14) сшивания спиноров на границах; 2) решение уравнения Паули при учете в нем только спин-орбитальной релятивистской поправки; 3) решение уравнения Паули с приближенными условиями сшивания спиноров (18), (19); 4) решение уравнения Паули с условиями сшивания спиноров (20), (21).

Случай кусочно-постоянного потенциала

Обсудим сначала точное решение уравнения Дирака, а затем три различных приближения, упомянутых выше. Нас интересуют уровни энергии электронов в потенциальной яме, сформированной на основе трех материалов (слоев), нумеруемых цифрами 1, 2, 3. Предполагается, что потенциалы материалов однородны в плоскости (x, y) и удовлетворяют условиям V_1, $V_3 > V_2$; $V_3 > V_1$. Первый материал занимает область $z < z_1$, второй – $z_1 < z < z_2$, а третий – $z > z_2$. Внутри каждого из материалов коэффициенты уравнений (2), (3) постоянны и частные решения могут находиться в виде

$$\varphi, \chi \propto e^{ik_j z} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{\rho}} . \tag{22}$$

Здесь $\boldsymbol{\rho}$ – вектор в плоскости гетерограниц (x, y); $\boldsymbol{k}$ – волновой вектор с компонентами k_x, k_y; k_j – z-компонента волнового вектора в материале с номером j (j = 1, 2, 3). Она с точностью до знака находится из условий разрешимости системы алгебраических уравнений, возникающей после подстановки (22) в уравнения (2), (3):

$$k_j = \sqrt{\frac{(\varepsilon - V_j)(2mc^2 + \varepsilon - V_j)}{c^2\hbar^2} - k_x^2 - k_y^2} . \tag{23}$$

Интересны состояния в потенциальной яме ($V_1 > \varepsilon > V_2$), которая несимметрична ($V_1 < V_3$). Принято считать, что в такой яме уровни должны быть расщеплены по спину при $k \neq 0$ (эффект Рашбы). В нашей системе k_1 и k_3 будут мнимыми, а k_2 – вещественным. Знаки этих компонент будем выбирать такими, для которых решения (22) отвечают распространяющимся или затухающим волнам в направлении оси z слева направо. Частные решения, соответствующие волновым числам с другим знаком k_j, представляют движущиеся (затухающие) волны в сторону уменьшения координаты z. В каждом из материалов строим общее решение уравнения Дирака в виде суммы двух волн (для верхнего спинора φ) $\varphi^j = \left(\phi_j e^{ik_j z} + \phi_{-j} e^{-ik_j z}\right) e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{\rho}}$, где постоянные спиноры $\phi_{\pm j}$ должны находиться из граничных условий задачи и из условий сшивания. Принимаем в качестве условий сшивания решений непрерывность биспинора на плоскостях разрыва потенциала, то есть условия $\varphi^1 = \varphi^2$, $\chi^1 = \chi^2$ при $z = z_1$ в форме (14) и, аналогично, $\varphi^2 = \varphi^3$, $\chi^2 = \chi^3$ при $z = z_2$. На бесконечности $z \to \pm\infty$ решения полагаем затухающими до нуля. Использование условий сшивания на границе $z = z_1$ приводит к соотношению

$$\begin{pmatrix} \phi_1 e^{ik_1 z_1} \\ \phi_{-1} e^{-ik_1 z_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_2 e^{ik_2 z_1} \\ \phi_{-2} e^{-ik_2 z_1} \end{pmatrix}, \tag{24}$$

где $p_{11} = \dfrac{1}{2\mu_1 k_1}\left((\mu_1 k_1 + \mu_2 k_2)\sigma_0 + i\mu_{21}[\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}]_z\right)$, $p_{12} = \dfrac{1}{2\mu_1 k_1}\left((\mu_1 k_1 - \mu_2 k_2)\sigma_0 + i\mu_{21}[\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}]_z\right)$,

$$p_{21} = \frac{1}{2\mu_1 k_1}\left((\mu_1 k_1 - \mu_2 k_2)\sigma_0 - i\mu_{21}[\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}]_z\right), \quad p_{22} = \frac{1}{2\mu_1 k_1}\left((\mu_1 k_1 + \mu_2 k_2)\sigma_0 - i\mu_{21}[\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}]_z\right),$$

$\mu_{21} = \mu_2 - \mu_1$, а σ_0 есть единичная двухрядная матрица.

Условия сшивания на границе $z = z_2$ имеют аналогичный вид

$$\begin{pmatrix} \phi_2 e^{ik_2 z_2} \\ \phi_{-2} e^{-ik_2 z_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_3 e^{ik_3 z_2} \\ \phi_{-3} e^{-ik_3 z_2} \end{pmatrix}, \tag{25}$$

где $h_{11} = \frac{1}{2\mu_2 k_2}\left((\mu_2 k_2 + \mu_3 k_3)\sigma_0 + i\mu_{32}[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\sigma}]_z\right)$, $h_{12} = \frac{1}{2\mu_2 k_2}\left((\mu_2 k_2 - \mu_3 k_3)\sigma_0 + i\mu_{32}[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\sigma}]_z\right)$,

$$h_{21} = \frac{1}{2\mu_2 k_2}\left((\mu_2 k_2 - \mu_3 k_3)\sigma_0 - i\mu_{32}[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\sigma}]_z\right), \quad h_{22} = \frac{1}{2\mu_2 k_2}\left((\mu_2 k_2 + \mu_3 k_3)\sigma_0 - i\mu_{32}[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\sigma}]_z\right),$$

$$\mu_3 = \left(1 + \frac{\varepsilon - V_3}{2mc^2}\right)^{-1}, \quad \mu_{32} = \mu_3 - \mu_2, \quad \mu_{13} = \mu_1 - \mu_3 .$$

Отметим, что двухрядные матрицы $p_{ij}(h_{ij})$ $(i, j = 1, 2)$ устроены следующим образом: их диагональные части пропорциональны единичной матрице, а недиагональные – $[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\sigma}]_z$ и имеют релятивистскую малость. Суммирование и перемножение таких матриц не меняет характера их устройства.

Поскольку мы интересуемся состояниями в квантовой яме, то в полученных уравнениях надо положить равными нулю коэффициенты ϕ_1 и ϕ_{-3} при налетающих волнах в первом и третьем слоях (ниже принято $z_1 = 0$, $z_2 = d$). Исключая с помощью (25) спиноры ϕ_2 и ϕ_{-2} из уравнения (24), получаем

$$(p_{11}\cdot h_{11} e^{-ik_2 d} + p_{12}\cdot h_{21} e^{ik_2 d})\phi_3 = 0 ; \tag{26}$$

$$\phi_{-1} = (p_{21}\cdot h_{11} e^{-ik_2 d} + p_{22}\cdot h_{21} e^{ik_2 d})\phi_3 e^{ik_3 d} . \tag{27}$$

Равенство нулю детерминанта матрицы, входящей в (26), определяет допустимые уровни энергии в потенциальной яме. После нахождения уровня энергии легко находится спинор ϕ_3, а затем по (25), (27) и $\phi_{-1}, \phi_2, \phi_{-2}$. В пренебрежении спиновым вкладом недиагональные элементы всех матриц p_{ij}, h_{ij} зануляются и мы получаем двукратно вырожденные уровни. Однако и при учете спинового вклада уровни в яме остаются вырожденными, поскольку равенство нулю детерминанта наблюдается при одновременном равенстве нулю как диагональных, так и недиагональных элементов. Действительно, у двумерной матрицы $p_{11}\cdot h_{11} e^{-ik_2 d} + p_{12}\cdot h_{21} e^{ik_2 d}$ диагональный элемент f_1 и недиагональный элемент f_2 отличаются друг от друга множителем, не равным нулю в рассматриваемом интервале энергии и не зависящим от ширины ямы. Для доказательства этого факта достаточно показать справедливость симметричного относительно циклической перестановки равенства

$$k_1^2\mu_1^2\mu_{32} + k_2^2\mu_2^2\mu_{13} + k_3^2\mu_3^2\mu_{21} = (k_x^2 + k_y^2)\mu_{21}\mu_{32}\mu_{13} , \tag{28}$$

что легко выполняется. Более того, оказывается, что в яме, построенной из произвольного набора кусочно-постоянных потенциалов, уровни энергии также не испытывают спинового расщепления. Таким образом, точный анализ дираковской задачи в кусочно-постоянном потенциале ямы демонстрирует отсутствие эффекта Рашбы. Однако в общем случае приближенного описания уровни в потенциальной яме расщепляются при учете недиагональных спиновых членов.

Интерес представляет оценка величины этого расщепления при различных приближенных описаниях состояний электронов в потенциальной яме. Все три упомянутых выше приближения можно описывать единообразно, заменяя лишь коэффициенты в матрицах p_{ij}, h_{ij} в согласии с выбранным вариантом описания. В случае, когда учитывается только спин-орбитальное взаимодействие в уравнении Паули (2 вариант описания), подобно случаю точного дираковского описания аналитически показывается, что спинового расщепления уровней в потенциальной яме не происходит. Условие, доказывающее этот факт, подобно (28) со своими значениями входящих в него коэффициентов. И только два последних случая (3-й, 4-й варианты описания) приводят к спиновому расщеплению уровней. Оно оказывается очень маленьким (на 10–11 порядков меньше глубины потенциальной ямы), хотя должно быть нулем при точном решении уравнения Дирака. Эту

ситуацию можно интерпретировать следующим образом. В первом порядке теории возмущений спин-орбитальное взаимодействие дает нулевой вклад (это известный результат [7], опирающийся на теорему Эренфеста) и проявляет себя только во втором порядке. Но в этом случае для получения результата, которому можно доверять, необходимо принять во внимание следующие по порядку малости члены разложения уравнения Дирака. Следует отметить, что в настоящем исследовании предполагалось, что потенциалы не зависят от координаты в плоскости потенциальной ямы. Это в точной задаче привело к отсутствию спинового расщепления уровней. Поэтому при поиске структур, проявляющих спиновое расщепление, необходимо принимать в расчет зависимость потенциалов от координат в плоскости потенциальной ямы. Следовательно, для того чтобы структура могла проявить спиновое расщепление уровней, она должна наряду с анизотропией обладать и неоднородностью в плоскости (x, y). В связи с этим свойством можно упомянуть давнюю экспериментальную работу [8], в которой были проведены тщательные измерения эффекта Шубникова – де Гааза, использованы хорошо подготовленные образцы и показано, что в однородных образцах эффекта Рашбы нет. Но даже в неоднородных образцах, где обнаруживаются биения осцилляций магнетосопротивления, они, согласно [8], не связаны с эффектом Рашбы, поскольку не имеют характерной зависимости от создаваемой анизотропии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Теоретическая физика. Т. 4. Релятивистская квантовая теория. Ч. 1. – М.: Наука, 1968. – 480 с.
2. Winkler R. Springer Tracts in Modern Physics. V. 191. Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. – Berlin; Heidelberg: Springer Verlag, 2003.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – 4-е изд., испр. – М.: Наука, 1989. – 768 с.
4. Chuang S.L. and Chang C.S. // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54. – No. 4. – P. 2491.
5. Aversa C. and Sipe J.E. // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 49. – No. 20. – P. 14542–14549.
6. Aversa C. and Sipe J.E. // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 47. – No. 11. – P. 6590–6597.
7. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. – М.: Наука, 1972. – С. 255.
8. Brosing S., Ennslin K., Warburton R.J., et al. // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 60. – No. 20. – P. 13989–13992.

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова
Томского государственного университета, г. Томск, Россия
E-mail: kargf@mail.ru

Поступила в редакцию 19.12.13.

Караваев Геннадий Федорович, д.ф.-м.н., профессор.