

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

На правах рукописи

Тележников Алексей Валентинович

**ЭВОЛЮЦИЯ КВАНТОВЫХ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ
И ТРАНСПОРТ В ГРАФЕНЕ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ
ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ**

Специальность 01.04.07 —
«физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д. ф.-м. н., профессор
В.Я. Демиховский

Нижний Новгород – 2014

Содержание

Введение	4
1 Волновые пакеты в системах с неэквидистантными уровнями Ландау: коллапс и возрождение	22
1.1 Долгосрочная циклотронная динамика релятивистских волновых пакетов: коллапс и возрождение	22
1.1.1 Основные уравнения	22
1.1.2 Эволюция релятивистского волнового пакета, состоящего из стационарных состояний, отвечающих энергиям одного знака	26
1.1.3 Пространственно-временная динамика мезоскопических волновых пакетов, содержащих состояния, отвечающие как положительным, так и отрицательным энергиям	37
1.2 Мезоскопические состояния в графене, находящемся в магнитном поле: коллапс и возрождение волновых пакетов	43
1.2.1 Модель	43
1.2.2 Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния одной энергетической зоны	44
1.2.3 Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния с положительными и отрицательными энергиями	48
1.3 <i>Zitterbewegung</i> волновых пакетов и кондактанс квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия	52
1.3.1 Электронные квантовые состояния в квазиодномерном канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы	52
1.3.2 Динамика волновых пакетов в квазиодномерном канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. <i>Zitterbewegung</i>	53

1.3.3	Контактанс квазиодномерного канала со спин-орбитальным взаимодействием	59
2	Динамика электронных волновых пакетов в 3D топологических изоляторах	65
2.1	Постановка задачи	65
2.2	Эволюция квазиодномерных электронных волновых пакетов в 3D топологическом изоляторе Bi_2Se_3	69
2.3	Эволюция двумерных электронных волновых пакетов в 3D топологическом изоляторе Bi_2Se_3	73
3	Электронные состояния в сверхрешетках со спин-орбитальным взаимодействием и в графене	82
3.1	Сверхрешетка на основе графена с периодически модулированной дираковской щелью	82
3.1.1	Дираковская частица в графеновой сверхрешетке	82
3.1.2	Интерфейсные состояния	85
3.2	Влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру полупроводниковых сверхрешеток	88
	Заключение	99
	Список публикаций автора по теме диссертации	101
	Литература	106
А	117
В	119
С	121

Введение

Актуальность и степень разработанности темы исследования

В последние годы в физике конденсированного состояния как теоретически, так и экспериментально активно исследуются различные низкоразмерные структуры. В частности, устойчивый интерес проявляется к изучению свойств 2D-электронного газа со спин-орбитальным взаимодействием (СОВ), графена, топологических изоляторов (ТИ) и др. Необычность свойств таких систем, прежде всего, связана как с их квантовой, так и с релятивистской природой. В частности, последние два объекта прежде всего привлекательны благодаря линейному закону дисперсии – как у релятивистской безмассовой частицы. В этой связи целесообразно исследовать общие закономерности физических явлений, связанных с особенностями такого спектра. Так, несомненный интерес представляет изучение пространственно-временной эволюции волновых пакетов за долгосрочный период.

Хорошо известно, что пространственно-временная эволюция квантовой системы с дискретным, но неэквидистантным спектром может быть весьма сложной. Как показано в работе Авербуха и Перельмана [1], для начального состояния, «собранного» из собственных состояний системы с квантовыми числами n из некоторой области вблизи заданного значения $n_0 \gg 1$, коэффициенты разложения спектра E_n в ряд Тейлора вблизи этого значения определяют различные временные масштабы эволюции волнового пакета.

Так, первоначально локализованный волновой пакет движется периодически вдоль классической траектории с периодом $T_{cl} = 2\pi\hbar/E'_{n_0}$. Однако, спустя некоторое время, нелинейные по $(n - n_0)$ слагаемые в разложении энергетического спектра E_n становятся существенными, что приводит к расплыванию волнового пакета. Следующий этап эволюции полуклассических волновых пакетов для большого класса квантовых систем универсален [1]. В частности, в момент вре-

мени $T_R = 4\pi\hbar/|E''_{n_0}|$ разность фаз отдельных компонент волновой функции пакета благодаря наличию квадратичных слагаемых в разложении спектра становится кратна 2π , что приводит к полному восстановлению волнового пакета. В моменты времени дробного возрождения $t = \frac{m}{n}T_R$ (где m и n – взаимно простые числа) разность фаз между подмножеством компонент собственных функций оказывается стационарной, волновой пакет распадается на серию подпакетов. После нескольких восстановлений формы пакета наблюдается сложное распределение плотности вероятности по классической траектории.

В течение последних десятилетий явления коллапса и возрождения были изучены теоретически и экспериментально в различных квантовых системах. В частности, полное и дробное восстановление волнового пакета было исследовано теоретически для ридберговского атома, молекул и низкоразмерных квантовых структур. Так, расчеты возмущения высокоэнергетических ридберговских состояний под воздействием короткого лазерного импульса, а также полной мощности излучения атома были выполнены в [2]. Пространственно-временная динамика атома водорода была рассмотрена в работе [3] путем построения волнового пакета с минимальной неопределенностью (т.е. когерентного состояния квантового гармонического осциллятора), движущегося по кеплеровской орбите. Можно показать, что и классические, и квантовые свойства, связанные с дискретностью и нелинейностью энергетического спектра, неизбежно приводят к долговременной эволюции волнового пакета (когда расплывшийся волновой пакет через некоторое время восстанавливает свою первоначальную форму – возрождается, потом снова коллапсирует и т.д.). Ромера и др. [4] изучали циклотронную динамику электронов в монослойном графене, где низкоэнергетические возбуждения являются безмассовыми дираковскими фермионами. Ими показано, что в случае, когда электроны описываются волновыми пакетами, содержащими состояния только с положительными энергиями (однозонный волновой пакет), наличие магнитного поля приводит к восстановлению осцилляций электрического тока. В случае, когда начальный пакет включает в себя состояния как с положительными, так и с отрицательными энергиями, восстановление электрического тока проявляется вместе с явлением *Zitterbewegung* (ZB), или *trembling motion*. Квазиклассическая эволюция и явления разрушения и возрож-

дения волновых пакетов в графеновых квантовых точках в перпендикулярном магнитном поле были изучены в [5].

Уравнение Дирака также предсказывает неожиданные особенности релятивистского движения. В [6] рассмотрена эволюция релятивистских волновых пакетов в магнитном поле и предсказано три режима: макроскопический, микроскопический и мезоскопический (промежуточный), когда энергия электрона включает в себя несколько десятков уровней Ландау. В этом случае релятивистская модель оказывается идентичной модели взаимодействия Джейнса-Каммингса и анти-Джейнса-Каммингса [7], широко используемой в квантовой оптике. В работе [6] был предложен релятивистский аналог состояний типа «шредингеровский кот» (или «дираковский кот») для релятивистских уровней Ландау, когда внешнее магнитное поле связывает состояния релятивистской частицы со спином $\frac{1}{2}$.

Русиным и Завадским рассмотрен эффект «дрожащего» движения (ZB) центра волнового пакета для релятивистских электронов, движущихся в вакууме в присутствии внешнего магнитного поля [8]. Так же как в классической работе Шредингера [9], они использовали одноэлектронное приближение и получили, что в этом случае эффект ZB очень мал. Авторы работы [8] замечают, что в соответствии с результатами, полученными в [10], полностью занятые электронные состояния с отрицательной энергией (дираковский вакуум) предотвращают появление интерференции и, соответственно, ZB. По этой причине ZB – математическое свойство одноэлектронного уравнения Дирака, которое не может наблюдаться для реальных электронов. Так, вычисления в [8] были сделаны для 2+1 и 3+1 уравнений Дирака для параметров, которые соответствуют движению захваченных ионов в недавних экспериментах [11].

В работе [12] изучена эволюция двухуровневого атома, взаимодействующего с квантующим полем, первоначально находящемся в когерентном состоянии. В этой системе исследовались явления коллапса и возрождения. Было показано, что возникновение коллапса связано с изменением начального состояния атома полем. При временах, равных половине времени возрождения, чистое состояние поля, которое представляет собой мезоскопическую суперпозицию когерентных состояний, может быть названо состоянием типа «шредингеровский кот».

Также явление коллапса и возрождения наблюдалось экспериментально в различных нелинейных квантовых моделях. В частности, это двухуровневый атом, запертый в микроволновой полости [13]; ридберговские волновые пакеты в атоме [14] и т.д. Интересно отметить, что методы лазерного разделения изотопов, которые используют явление возрождения, были предложены и реализованы в [15]. В эксперименте Монро и др. [16] была реализована суперпозиция двух различных когерентных состояний для ионного осциллятора в гармоническом потенциале.

В работе [17] теоретически исследована квантовая динамика свободных релятивистских частиц, описываемых трехмерными гауссовскими волновыми пакетами с различной начальной спиновой поляризацией. Также изучено влияние симметрии начального волнового пакета на его кинематические характеристики, такие как средняя скорость, направление ZB, спиновая плотность и т.д. Ранее этими же авторами были изучены эффекты расщепления и ZB электронных волновых пакетов, сформированных в 2D электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и в монослойном графене [18–20].

В работе [A1] исследуется долгосрочная циклотронная динамика релятивистских электронов, которые подчиняются уравнению Дирака. Для этого выбирается инерциальная система, в которой компонента импульса вдоль направления магнитного поля равна нулю. Такой специальный выбор системы отсчета позволяет без потери общности представить большинство результатов в достаточно простой аналитической форме. Для описания поведения релятивистской частицы используется суперпозиция стационарных состояний, являющихся решением уравнения Дирака, с квантовыми числами $n \sim n_0 \gg 1$. Показано, что структура четырехкомпонентной электронной волновой функции, а также наличие в спектре двух энергетических зон приводит к довольно сложной динамике волновых пакетов. Далее проводится аналитическое и численное исследование пространственно-временной эволюции электронной функции плотности вероятности и спиновой плотности, а затем данная эволюция визуализирована во времени. В частности, в работе обсуждается аналогия между стационарными состояниями релятивистского электрона в магнитном поле и моделью Джейнса-Каммингса. Далее изучается динамика электронных волновых пакетов в случае, когда они содержат состояния только с положительными энергетическими

уровнями Ландау. Визуализирована пространственная структура пакетов, которая формируется в моменты дробного возрождения, обсуждаются физические эффекты, связанные с появлением таких структур, также представлено подробное описание спиновой прецессии. Проводится исследование мезоскопического волнового пакета, который представляет собой суперпозицию стационарных состояний как с положительными, так и с отрицательными энергиями. Также обсуждаются некоторые особенности, сопровождающие явление возрождения для таких волновых пакетов, в частности, эффект ZB. Ряд нетривиальных аналитических вычислений вынесен в приложения А, Б и В.

В физике конденсированного состояния материалом с линейным законом дисперсии, подобно дираковской безмассовой частице, в настоящее время является графен. Кристаллическая структура графена (точечная группа D_{6h}) представляет собой две треугольные подрешетки (условно – A и B), вложенные одна в другую, образуя гексагональную кристаллическую решетку (рис.1(a)). Соответственно, примитивная ячейка графена содержит два атома углерода, что обуславливает (без учета спин-орбитального взаимодействия) двухкомпонентность электронной волновой функции. При этом верхняя компонента волновой функции отвечает локализации электрона на подрешетке A , нижняя – на атомах подрешетки B : $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}$. Таким образом, в графене двухкомпонентность волновой функции связана не со спином, а с псевдоспином, а одноэлектронный эффективный гамильтониан может быть записан с помощью матриц Паули $\hat{H} = v_F (\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma})$ ($v_F \approx 10^8$ см/с – скорость Ферми). Соответственно, псевдоспин в графене всегда оказывается параллелен импульсу.

Зона Бриллюэна графена представляет собой правильный шестиугольник, в вершинах которого расположены неэквивалентные точки K и K' (две долины), в которых происходит касание зоны проводимости и валентной зоны, образуя так называемые точки Дирака (рис.1(b)). Вблизи этих точек закон дисперсии носит линейный характер, и носители в графене при низких энергиях описываются гамильтонианом дираковского типа. Естественное положение уровня Ферми в графене совпадает с точкой Дирака. В то же время его положением можно эффективно управлять с помощью электрического поля затвора, что является очень привлекательным для развития электроники. Зонная структура идеального листа

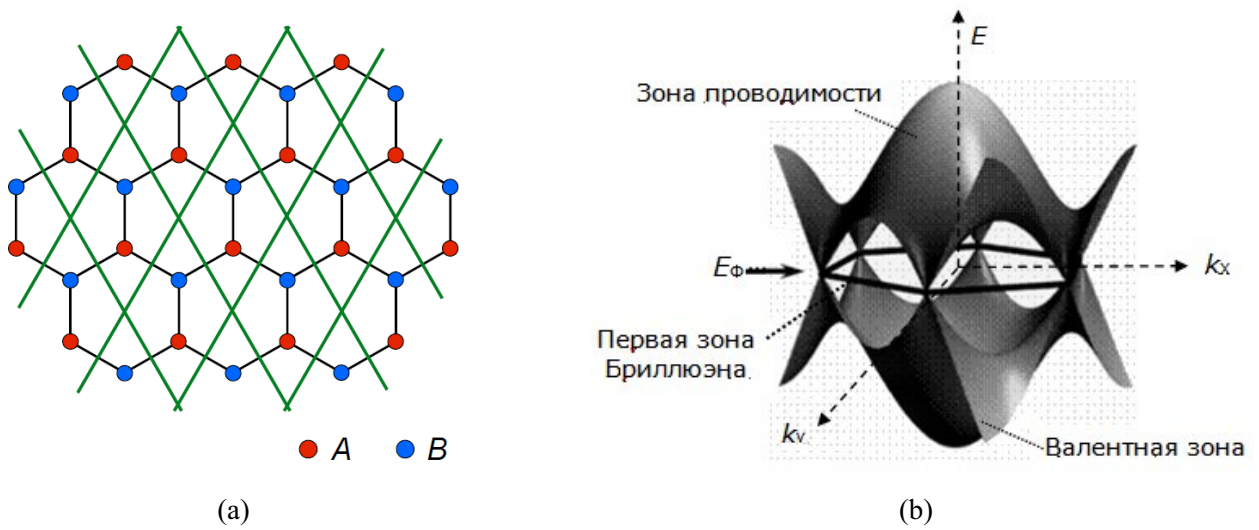


Рисунок 1: (a) Кристаллическая решетка графена, состоящая из вложенных одна в другую треугольных подрешеток A и B ; (b) схематичное изображение энергетического спектра монослойного графена.

графена не имеет энергетической щели. По этой причине дираковские электроны являются безмассовыми и проявляют необычные свойства, такие как полное прохождение через потенциальный барьер при нормальном падении (так называемый парадокс Клейна [24, 25]), ZB [20, 26] и т.д. Таким образом, в физике конденсированного состояния несколько лет назад появился реальный объект, на котором оказалось возможным исследовать поведение безмассовых заряженных частиц.

Так, в работе [A2] исследуется эволюция волновых пакетов в монослойном и двухслойном графене, помещенном в перпендикулярное магнитное поле. Двухкомпонентность волновой функции, а также наличие двух энергетических зон в графене обуславливает сложную долгосрочную динамику волновых пакетов. Аналитически и численно исследована пространственно-временная эволюция плотности вероятности для пакетов, содержащих состояния как одной, так и двух энергетических зон. Волновые пакеты визуализированы в характерные моменты времени коллапса и возрождения. Обсуждается динамика волновых пакетов, возбужденных в k -пространстве вблизи неэквивалентных дираковских точек.

Релятивистским эффектом, связанным с взаимодействием спинового магнитного момента электрона с магнитным моментом его орбитального движения,

является спин-орбитальное взаимодействие. Другими словами, если связать систему отсчета с движущимся в электрическом поле ядра электроном, то на его собственный магнитный момент будет действовать магнитное поле $\mathbf{B} = \frac{1}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{E}]$, тем самым обеспечивая взаимодействие спиновой и орбитальной степеней свободы. Однако, чтобы корректно определить величину спин-орбитального взаимодействия необходимо учитывать не только магнитное поле, возникающее при переходе в собственную систему отсчёта, но и релятивистский кинематический эффект томасовской прецессии [27]. Альтернативный метод расчета связан с нерелятивистским приближением в уравнении Дирака (с точностью до членов v^2/c^2) и последующим преобразованием Фолди-Воутхаузена. В результате, гамильтониан спин-орбитального взаимодействия принимает вид $\hat{H}_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} [\mathbf{k}, \nabla V]$ (m_0 – масса свободного электрона, c – скорость света, $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ – волновой вектор, ∇V – градиент потенциальной энергии частицы). Хорошо известно, что в атомной физике спин-орбитальное взаимодействие (наряду с другими релятивистскими поправками того же порядка) приводит к тонкой структуре атомных спектров.

Однако, влияние спин-орбитального взаимодействия на электронные состояния в объемных полупроводниках и в низкоразмерных полупроводниковых структурах обладает своими особенностями. Так, вид гамильтониана спин-орбитального взаимодействия существенным образом зависит от симметрии 3D-кристалла или низкоразмерной структуры. В настоящее время одними из самых популярных и технологически удобных полупроводников являются соединения типа A_3B_5 с гексагональной структурой вюрцита или структурой цинковой обманки, типичными представителями которого являются $GaAs$ и $InGaAs$. В таких 3D-полупроводниках – без центра инверсии – спин-орбитальное взаимодействие описывается известным гамильтонианом Дрессельхауза [28], содержащим кубические по k слагаемые. В двумерном же случае размерное квантование приводит к спин-орбитальному взаимодействию двух типов с линейными по k слагаемыми в гамильтонианах. Так, если структура выращена из полупроводника без центра инверсии, то спин-орбитальное взаимодействие описывается гамильтонианом Дрессельхауза $H_D = \beta(\hat{k}_x\sigma_x - \hat{k}_y\sigma_y)$. Величина константы β довольно сильно зависит от ширины квантовой ямы. В то же время, если структура – квантовая яма – является асимметричной (т.е. когда $V(z) \neq V(-z)$, z – ось кван-

товой ямы), такой вклад в спин-орбитальное взаимодействие описывается гамильтонианом Рашбы [29] $\hat{H}_R = \alpha(\hat{k}_y\sigma_x - \hat{k}_x\sigma_y)$ с константой α , которая зависит от степени асимметрии квантовой ямы. Более того, ее можно также изменять, прикладывая перпендикулярно к плоскости 2D-электронного газа электрическое поле. Таким образом, на 2D-электрон действует эффективное магнитное поле, в общем случае состоящее из двух слагаемых. Так или иначе изменяя параметры квантовой ямы, можно управлять константами спин-орбитального взаимодействия Рашбы и Дрессельхауза и, следовательно, видоизменять спектр 2D-электронного газа.

Одной из фундаментальных задач спинтроники является управление потоками поляризованных по спину электронов. В связи с этим в ряде работ, опубликованных в последние годы, рассматривались такие устройства, как спиновые фильтры, спиновые транзисторы и т.д. В частности, в работах [30, 31] обсуждается возможность управления баллистическим кондактансом квазиодномерного канала с помощью постоянного магнитного поля, ориентированного различным образом в плоскости 2D-электронного газа. В работах [A3], [A4] нами рассмотрен 2D-электронный газ в квазиодномерном канале, разделенном туннельно-прозрачным барьером. Такой барьер может быть создан методами электронной или зондовой литографии. Рассчитан энергетический спектр, а также кондактанс канала. Показано, что при изменении напряжения на барьере возникают дополнительные экстремумы в спектре, что приводит к немонотонному изменению кондактанса. Таким образом, предложен способ управления кондактансом в гетеропереходах. Кроме того, для более полного изучения свойств канала исследована динамика волновых пакетов в тонких проволоках на базе гетероструктур $GaAs/In_{0,23}Ga_{0,77}As$ и $AlGaAs/GaAs$ со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Найдены спиновые поляризации. Обнаружен эффект «разбегания» волновых пакетов относительно их центра масс, а также ZB центров этих пакетов. Проведено сравнение характера осцилляций волновых пакетов и спиновой плотности для свободных 2D-электронов и в условиях конфайнмента. Расчеты проведены для параметров реальных структур как со слабым, так и сравнительно сильным спин-орбитальным взаимодействием.

Как известно, спин-орбитальное взаимодействие в некоторых материалах приводит к формированию поверхностных (краевых) состояний, являющихся

топологически защищенными от рассеяния. Как в теории, так и в экспериментах сравнительно недавно обнаружено новое семейство таких материалов – топологических диэлектриков, или топологических изоляторов, которые были открыты в 2008 г. Простейший пример топологического изолятора – зонный диэлектрик (трехмерный или двумерный), образующий поверхностные проводящие состояния. В общем случае, топологический изолятор – любая система со щелью в спектре в объёме, но бесщелевыми состояниями на поверхности (как схематично изображено на рис. 2). Прототипом новых объектов – топологических изоляторов – может служить, в частности, контакт (гетеропереход) между двумя материалами (полупроводниками) с взаимно инвертированными зонами, предложенный в работе [32].

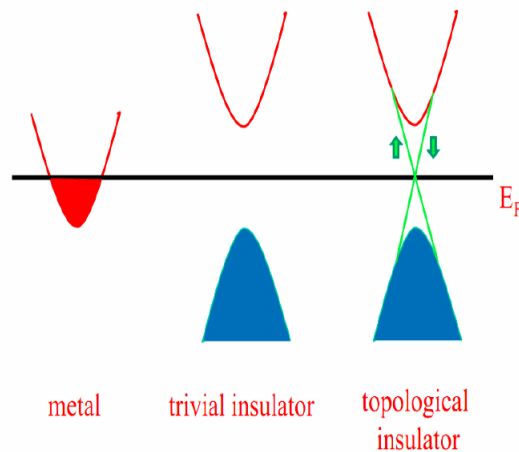


Рисунок 2: Схематичное изображение энергетического спектра топологического изолятора.

Состояние, возникающее в двумерном электронном газе под действием перпендикулярного к его плоскости внешнего магнитного поля, принято называть квантовым холловским состоянием. Вещество в таком состоянии, как и обычный диэлектрик, не проводит ток. Однако, на границе такой структуры вследствие отражения 2D-электронов от краев образуется проводящая область, направление движения электронов вдоль которой определяется направлением внешнего магнитного поля и, как следствие, рассеяние назад из-за примесей практически отсутствует. В отличие от 2D-электронного газа, в топологических изоляторах функцию магнитного поля играет спин-орбитальное взаимодействие, и электроны могут перемещаться вдоль краев в обоих направлениях (в зависимости от на-

правления их спинов) [33–35]. Существование таких спин-холловских изоляторов оказалось подтверждено на эксперименте, проведенном на квантовых ямах в гетероструктурах $HgTe$, $CdTe$ [36]. Таким образом, впервые удалось наблюдать двумерные топологические изоляторы. Известно, что материалы, являющиеся трехмерными топологическими изоляторами, должны обладать сильным спин-орбитальным упорядочением с энергией порядка ширины запрещенной зоны. Такими материалами оказались Bi_xSb_{1-x} [37], Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 и Sb_2Te_3 [38], Bi_2Te_2Se [39], $TlBiSe_2$ [40].

3D топологические изоляторы подразделяются на два класса: «слабые» и «сильные». В последнем случае энергетический спектр на поверхности нетривиального диэлектрика содержит нечетное число дираковских точек, определяемых эффективным гамильтонианом вида $\hat{H}_{TI} = v_F \mathbf{n} [\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma}]$ (\mathbf{n} – вектор нормали к поверхности топологического изолятора). Таким образом, на поверхности топологического изолятора спин электрона жестко связан с направлением его импульса вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия в объеме топологического изолятора. Ко «второму поколению» сильных топологических изоляторов относятся Sb_2Se_3 , Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 с величиной запрещенной зоны порядка 0,1 – 0,3 эВ, чего достаточно для проявления специфических свойств этих материалов даже при комнатных температурах. Энергетический спектр поверхностных состояний в данном случае состоит из одной точки Дирака.

Положение уровня Ферми в топологических изоляторах определяется химическим составом вещества. Однако, с помощью легирования поверхности и объема топологических диэлектриков определенными примесями возможно изменять положение уровня Ферми, например, в Bi_2Se_3 [41]. Также управлять уровнем Ферми в объеме и на поверхности топологического изолятора можно с помощью изменения стехиометрии, а также с помощью отжига.

Кроме перечисленных выше топологических изоляторов были предсказаны также топологические изоляторы, в которых отсутствует спин-орбитальное взаимодействие – это так называемые топологические кристаллические изоляторы [42]. Как установлено недавно в работе [43], к этому классу соединений относятся сплавы $Pb_{1-x}Sn_xSe$ и кристаллы $SnTe$. Также объектами, относящимися к семейству топологических изоляторов, являются сверхтекучий $^3He - B$ [44], а также лента Мёбиуса, сделанная из графеновой ленты [45].

Таким образом, на поверхности материала, принадлежащего классу топологических изоляторов, возникают поверхностные проводящие состояния с линейным законом дисперсии и жестко связанным с направлением импульса спином электрона. Естественно, что в случае когда топологический изолятор представляет собой пленку конечной толщины, возникающие на каждой ее поверхности (топологически защищенные) состояния, в принципе, будут оказывать влияние друг на друга. Очевидно, что это влияние будет тем сильнее, чем больше перекрываются волновые функции стационарных состояний на противоположных поверхностях топологического изолятора. Этот эффект, приводящий к качественной перестройке поверхностного спектра, максимально проявляется в случае тонких пленок (*ultrathin film*). Исследованию данного явления посвящено немало работ (см., например, [46]). Результатом квантового туннелирования поверхностных состояний является, прежде всего, появление в их спектре щели, не только величина которой, но и знак оказываются функцией толщины пленки. Кроме того, ориентация спина носителя в тонкой пленке зависит от его волнового вектора \mathbf{k} . Причем, в окрестности Γ -точки зоны Бриллюэна она определяется величиной щели, а вблизи границ – «спин-орбитальным» слагаемым $Bk^2\sigma_z$.

Описанные особенности спектра поверхностных состояний 3D топологических изоляторов дают повод к интенсивному и всестороннему изучению этих материалов как теоретически, так и экспериментально. Так, в работе [A5] проведено теоретическое исследование пространственно-временной эволюции электронных волновых пакетов, сформированных в тонких пленках и на поверхности 3D топологических изоляторов на примере Bi_2Se_3 . Эволюция таких пакетов определяется спецификой граничных (поверхностных) квантовых состояний топологического изолятора, а также начальными размерами и спиновой поляризацией. Установлена роль основных параметров гамильтониана, определяющих форму электронной и спиновой плотности и характер осцилляций типа ZB. Для аналитических расчетов использован метод стационарной фазы.

Из-за эффекта Клейна локализовать электроны в графене электростатическим потенциалом невозможно. Это свойство графена затрудняет его применение в электронных устройствах [47]. Однако, как недавно было показано в [48], есть возможность локализовать безмассовые дираковские частицы в листе графена с помощью неоднородного магнитного поля. Локализация также может быть до-

стигнута комбинацией электрического и однородного магнитного полей [49, 50]. Кроме того, дираковские электроны могут быть локализованы только электростатически в щелевом графене.

Щель может быть открыта вследствие влияния подложки или создания поля напряжений, а также осаждением или адсорбцией молекул на слой графена. Например, две углеродные подрешетки графена, расположенные на гексагональном нитриде бора ($h - BN$), становятся неэквивалентными благодаря их взаимодействию с подложкой, в результате чего в спектре открывается щель [51]. Гидрогенизированный слой графена (графан) является полупроводником с величиной щели порядка нескольких эВ [52].

Кроме того, существует возможность пространственной модуляции щели (т.н. массовые частицы) в графене. Ранее было показано, что пространственная зависимость массы приводит к подавлению туннелирования Клейна и возможности формирования локализованных состояний [53, 54]. Необходимая щелевая модуляция может быть создана, например, в графене на подложке из различных диэлектриков. Также для этой цели эффективно использование неоднородно гидрогенизированного графена или графенового листа с неравномерно осажденными молекулами CrO_3 . Соответственно, можно изготовить различные графеновые гетероструктуры с переменной щелью. В частности, путем периодической модуляции ширины запрещенной зоны на основе графена может быть сформирована сверхрешетка (СР).

В последнее время электронная структура графена во внешнем периодическом потенциале являлась предметом многочисленных исследований [55–70]. Возрастающий интерес к сверхрешеткам на основе графена связан с предсказанной возможностью изготовления структуры из системы уровней с помощью периодического потенциала, что открывает новые пути для приготовления электронных приборов на основе графена. Сверхрешетки на основе графена уже получены экспериментально. Например, эпитаксиально выращенный на металлических поверхностях графен [66–69] представляет собой образец сверхрешетки с периодом в несколько нанометров. Недавние исследования с помощью сканирующей туннельной микроскопии [70] гофрированного монослоя графена на Rh-фольге показали, что квазипериодические рипплы создают в графене слабый одномерный электрический потенциал, из-за чего в спектре сверхрешет-

ки появляются точки Дирака. Также теоретически было показано, что одномерный периодический потенциал влияет на транспортные свойства графена. Так, например, электростатический потенциал типа Кронег-Пенни обуславливает сильную анизотропию групповой скорости носителей вблизи дираковской точки [55, 59], что приводит к так называемому явлению суперколлимации [55, 56]. Кроме того, в спектре сверхрешетки появляются новые (экстра) точки Дирака в зоне Бриллюэна. Эти особенности также были исследованы в различных типах графеновых сверхрешеток, включая магнитную сверхрешетку с магнитными барьерами из дельта-функций [60–65]. В работе [61] проведены первопринципные исследования электронной структуры графен-графеновой сверхрешетки, выполненной из чередующихся полосок обычного и гидрогенизированного графена (графана). Было установлено, что в отличие от других графеновых наноструктур сверхрешетки на основе гидрогенизированного графена проявляют как прямые, так и не прямые ширины запрещенных зон.

Модель Кронег-Пенни, рассматриваемая применительно к графеновой сверхрешетке, также используется во многих других физических проблемах, таких как моделирование полупроводниковых сверхрешеток или динамики релятивистской частицы. Хотя уравнения, описывающие одночастичную эволюцию, отличаются для упомянутых выше систем, явный вид дисперсионных соотношений, полученных в рамках модели Кронег-Пенни, похожи друг на друга. Тем не менее, индивидуальные особенности этих систем приводят к качественным различиям в их зонной структуре. К примеру, дисперсионное соотношение для 1D-релятивистского электрона в потенциале Кронег-Пенни [71] аналогично выражению для двумерных электронов в 1D-графеновой сверхрешетке (см. уравнение 3.9 ниже). В последнем случае, однако, периодический потенциал формируется двумя параметрами, которые имеют различное значение с точки зрения релятивистской физики. Так, относительное смещение зон V можно интерпретировать как компоненту времениподобного вектора, а величину щели Δ – как скалярный потенциал. Это обстоятельство, вкуче с двумерностью электронного газа, обуславливает фундаментальные свойства электронной структуры сверхрешетки (в том числе появление экстра-дираковских точек).

В работе [Аб] исследуются электронные состояния в одномерной графеновой сверхрешетке с периодически модулированной щелью и относительным сме-

щением зон, характеризуемым некоторым потенциалом, где щель и потенциал являются кусочно-постоянными функциями координаты x . Модель подобной сверхрешетки была предложена несколько ранее [72]. Однако, тогда не было проведено детального исследования электронной структуры сверхрешеток подобного типа в зависимости от широкого спектра параметров системы.

Понятие интерфейсного состояния по аналогии с поверхностными таммовскими состояниями [73] было введено в 1949 г. Джеймсом [74] и представляет собой локализованное состояние вблизи резкого интерфейса, соединяющего два различных материала. Подобным интерфейсом может служить скачок потенциала Кронегга-Пенни, который используется для моделирования рассматриваемой сверхрешетки. Таким образом, в каждой ячейке сверхрешетки могут существовать интерфейсные (приграничные) состояния, и волновая функция электрона (дырки) строится из таких состояний. Для этого случая получены соответствующие условия и значения параметров системы.

Наряду со сверхрешетками из «новых» материалов типа графена (или топологических изоляторов), стабильный интерес проявляется к традиционным полупроводниковым сверхрешеткам. В частности, в последние годы возрастает интерес к изучению спиновых явлений в них (см., например, [75]). Расчет квантовых состояний и изучение транспортных явлений в таких структурах представляет собой актуальную проблему физики конденсированных систем в связи с серьезными перспективами их использования в задачах электро- и спинтроники. В частности, квантовые состояния и транспорт в латеральных сверхрешетках со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы были рассмотрены в [76]. В работе [A7] исследуются мультислойные гетероструктуры (сверхрешетки) на основе кубических полупроводников с решеткой цинковой обманки и минимумом зоны проводимости в Γ -точке, что является причиной наличия спин-орбитального взаимодействия Дрессельхауза. Рассчитан энергетический спектр (зонная структура), найдены блоховские функции электронов, а также изучено влияние периодического потенциала сверхрешетки на геометрию изоэнергетических поверхностей с учетом спин-орбитального взаимодействия. Вычислены спиновые поляризации электронов в сверхрешетках с прямоугольными потенциалами (типа Кронегга-Пенни). Найденные особенности энергетического спектра и волновых функций, связанные со спин-орбитальным

взаимодействием, необходимо учитывать при расчетах лазеров терагерцевого диапазона.

Цели и задачи работы

Целью работы является теоретическое исследование особенностей пространственно-временной эволюции электронных волновых пакетов, в том числе явления *Zitterbewegung*, в различных квантовых системах, включая релятивистские электроны, описываемые уравнением Дирака, электроны в монослойном графене, в квантовых проволоках со спин-орбитальным взаимодействием и в 3D топологических изоляторах, а также исследование зонной структуры в сверхрешетках на основе полупроводников без центра инверсии и графена.

Для достижения поставленных целей решались следующие задачи:

1. В упомянутых выше системах исследованы стационарные квантовые состояния: найден энергетический спектр и рассчитаны волновые функции.
2. Проведен анализ особенностей долгосрочной пространственно-временной эволюции волновых пакетов, связанных с явлениями их коллапса и возрождения, найдены соответствующие времена, а также изучены условия возникновения и характер *Zitterbewegung*.
3. Для различных начальных состояний волновых пакетов проведен расчет пространственного распределения компонент спиновых плотностей, а также проанализированы особенности спиновой динамики носителей.
4. Рассчитан кондактанс квантового одномерного канала (квантовой проволоки), разделенного туннельно-прозрачным барьером. Установлена немонотонная зависимость кондактанса от энергии Ферми электронов.
5. Получено дисперсионное уравнение, определяющее энергию электрона в графеновой сверхрешетке; найдена область параметров сверхрешетки, при которых на границе раздела двух областей существуют приграничные (так называемые интерфейсные) состояния.

6. Проведен расчет изоэнергетических поверхностей в полупроводниковой сверхрешетке; найдено расщепление энергетических зон, связанное со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза.

Научная новизна диссертации определяется оригинальностью поставленных задач и полученными новыми результатами. Так, впервые в работе проведено исследование эффектов коллапса и возрождения, а также явления *Zitterbewegung* релятивистских волновых пакетов, волновых пакетов в графене в присутствии внешнего магнитного поля и на поверхности 3D топологических изоляторов. Установлено, что определенная пространственно-спиновая симметрия начального волнового пакета определяет его форму в последующие моменты времени. Изучена связь между параметрами неэквидистантного спектра стационарных состояний и характерными временами долгосрочной динамики волновых пакетов – временем коллапса и возрождения. Волновые пакеты визуализированы в различные моменты времени.

При анализе электронных состояний в графеновой сверхрешетке впервые установлена принципиальная возможность существования приграничных состояний на границе раздела двух областей, а также получены выражения для параметров сверхрешетки, при которых эти состояния должны реализовываться. В полупроводниковой сверхрешетке со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза найдены изоэнергетические поверхности, а также вычислена величина спин-орбитального расщепления минизон.

Теоретическая и практическая значимость работы

Новые научные результаты, полученные в диссертационной работе, могут быть полезны при теоретическом исследовании спин-электронного транспорта в квантовых проволоках, графене, топологических изоляторах и полупроводниковых сверхрешетках, а также для интерпретации результатов, полученных в ходе различных экспериментов на низкоразмерных структурах.

Основные положения, выносимые на защиту

1. В процессе долгосрочной эволюции релятивистских волновых пакетов, а также волновых пакетов в графене в магнитном поле наблюдается коллапс и возрождение электронной плотности вероятности, сопровождающиеся ос-

цилляциями как средней скорости волнового пакета, так и среднего значения проекции спина (псевдоспина). Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния с положительными и отрицательными энергиями, сопровождается также осцилляциями их центра — *Zitterbewegung* — с характерными частотами порядка $\sim 10^{21} \text{ с}^{-1}$ для релятивистского волнового пакета и $\sim 10^{15} \text{ с}^{-1}$ — для пакета в графене.

2. Управление кондактансом квазиодномерного канала со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы возможно с помощью внешнего управляющего электрода, модифицирующего энергетический спектр. При этом должны наблюдаться дополнительные пики проводимости канала.
3. Исследована когерентная динамика волновых пакетов, сформированных из поверхностных состояний в 3D топологических диэлектриках типа Bi_2Se_3 . Аналитически и численно рассчитаны электронная и спиновая плотности, а также осцилляции типа *Zitterbewegung* при различных значениях параметров гамильтониана. Рассмотрено влияние основных характеристик пакетов (размеров, спиновой поляризации) на расщепление, изменение формы и осцилляции их средней скорости.
4. В сверхрешетке на основе графена с периодически модулированной дираковской щелью в определенной области параметров сверхрешетки возможно существование интерфейсных (неосциллирующих) состояний.
5. В сверхрешетке на основе полупроводников со структурой цинковой обманки исследована роль спин-орбитального взаимодействия в формировании энергетического спектра. Изучено влияние потенциала сверхрешетки на геометрию изоэнергетических поверхностей с учетом спин-орбитального взаимодействия. Величина расщепления минизон имеет порядок 1 мэВ, что соответствует терагерцевому диапазону.

Апробация результатов

По результатам исследований, отраженных в диссертации, опубликовано 27 научных работ, из них 7 журнальных статей [A1]–[A7], 20 работ в сборниках трудов и тезисов конференций [A8]–[A27]. Основные положения и результаты

диссертации докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

1. XIII–XVIII международные симпозиумы «Наноп физика и наноэлектроника» (г. Н.Новгород, 2009–2014 г.г.).
2. XVIII–XIX Уральские международные зимние школы по физике полупроводников (г. Екатеринбург, 2010 г., 2012 г.).
3. 3–5-я всероссийские конференции молодых ученых «Микро-, нанотехнологии и их применение» (г. Черноголовка, 2008, 2010, 2012 г.г.).
4. 2–4-й международные междисциплинарные симпозиумы «Среды со структурным и магнитным упорядочением» (г. Ростов-на-Дону, 2009, 2011, 2013 г.г.).
5. 1-й, 3-й и 4-й международные междисциплинарные симпозиумы «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» (г. Ростов-на-Дону, 2008, 2012, 2014 г.г.).
6. 13-я международная научная конференция-школа «Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение» (г. Саранск, 2014 г.).

Личный вклад автора

Содержание диссертационной работы и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Автор принимал непосредственное участие в постановке и решении теоретических задач, в обсуждении полученных результатов и их интерпретации, а также в подготовке работ к печати.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка публикаций автора по теме диссертации, библиографии (111 наименования) и трех приложений. Полный объем диссертации составляет 123 страницы, включая 42 рисунка.

Работа выполнена на кафедре теоретической физики физического факультета Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

Глава 1

Волновые пакеты в системах с неэквидистантными уровнями Ландау: коллапс и возрождение

1.1 Долгосрочная циклотронная динамика релятивистских волновых пакетов: коллапс и возрождение

1.1.1 Основные уравнения

Хорошо известно, что релятивистская квантово-механическая частица со спином $\frac{1}{2}$ (например, электрон) описывается уравнением Дирака с гамильтонианом

$$\hat{H} = c\mathbf{p}\boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta,$$

где c – скорость света в вакууме, m – масса электрона, α_i и β – матрицы Дирака

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3,$$

σ_i – матрицы Паули.

Следствием уравнения Дирака в нерелятивистском пределе (с точностью до членов v^2/c^2) является спин-орбитальное взаимодействие. В то же время, новый класс материалов в физике конденсированного состояния — топологические изоляторы — являются, как правило, веществами с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Поверхностные состояния в 3D топологических изоляторах описываются, как следствие, эффективным гамильтонианом, который имеет ма-

тематическую форму, идентичную гамильтониану Дирака. Таким образом, практически каждый топологический изолятор описывается дираковским уравнением [91].

Рассмотрим циклотронную динамику релятивистского электрона в магнитном поле $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. В калибровке Ландау, где векторный потенциал выбирается в виде $\mathbf{A} = (-B \cdot y, 0, 0)$, гамильтониан может быть записан как

$$\hat{H} = c\alpha_x(\hat{p}_x - eBy/c) + c\alpha_y\hat{p}_y + c\alpha_z\hat{p}_z + mc^2\beta. \quad (1.1)$$

Уравнение Дирака с гамильтонианом (1.1) допускает решение вида

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\exp\left(\frac{ip_x x + ip_z z}{\hbar}\right)}{2\pi\hbar} U(y). \quad (1.2)$$

Не теряя общности, положим $p_z = 0$ (мы всегда можем выбрать соответствующую инерциальную систему отсчета). Тогда рассматриваемое уравнение примет вид

$$\hat{H}U = EU \quad (1.3)$$

с эффективным гамильтонианом

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} mc^2 & c\hat{p}_y\sigma_y - eB(y - y_c)\sigma_x \\ c\hat{p}_y\sigma_y - eB(y - y_c)\sigma_x & -mc^2 \end{pmatrix}, \quad (1.4)$$

где $y_c = cp_x/eB$. Нетрудно проверить, что оператор

$$\hat{K} = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

коммутирует с гамильтонианом (1.4). Поэтому мы можем рассматривать функции, которые одновременно являются собственными функциями операторов \hat{H} и \hat{K} . Очевидно, что собственные функции оператора \hat{K} , отвечающие собственным значениям $\lambda_k = \pm 1$, могут быть записаны в виде

$$\psi_{\lambda_k=1} = (f|\uparrow\rangle, \chi|\downarrow\rangle)^T = (f, 0, 0, \chi)^T, \quad (1.6)$$

$$\psi_{\lambda_k=-1} = (f|\downarrow\rangle, \chi|\uparrow\rangle)^T = (0, f, \chi, 0)^T, \quad (1.7)$$

где $f = f(\mathbf{r}, t)$, $\chi = \chi(\mathbf{r}, t)$ – произвольные функции переменных \mathbf{r} и t . Спиноры «спин вверх» $|\uparrow\rangle$ и «спин вниз» $|\downarrow\rangle$ есть

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

Очевидно, что для заданного значения λ_k две компоненты дираковского спинора равны нулю: $\psi_2 = \psi_3 = 0$ для $\lambda_k = 1$ и $\psi_1 = \psi_4 = 0$ для $\lambda_k = -1$. Таким образом, в зависимости от знака λ_k гильбертово пространство решений уравнения Дирака может быть разделено на два инвариантных подпространства. Соответственно, дираковский гамильтониан разлагается на два слагаемых. Одно из них есть пара компонент ψ_1 и ψ_4 , и эта часть идентична модели Джейнса-Каммингса, описывающая взаимодействие двухуровневого атома с квантующим одномодовым полем. Оставшееся слагаемое с парой компонент ψ_2 и ψ_3 эквивалентно взаимодействию анти-Джейнса-Каммингса. Вследствие этого можно работать с двухкомпонентной волновой функцией $\psi(y) = (f(y), \chi(y))^T$. Для значения $\lambda_k = 1$ получаем

$$\begin{pmatrix} mc^2 & -\sqrt{2\hbar e c B} \hat{a} \\ -\sqrt{2\hbar e c B} \hat{a}^\dagger & -mc^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f(y) \\ \chi(y) \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} f(y) \\ \chi(y) \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Здесь введены операторы рождения и уничтожения для гармонического осциллятора

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} (y - y_c) - \frac{i\hat{p}_y}{\sqrt{\hbar m\omega}} \right), \quad (1.10)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} (y - y_c) + \frac{i\hat{p}_y}{\sqrt{\hbar m\omega}} \right), \quad (1.11)$$

где $\omega = eB/mc$ – циклотронная частота для нерелятивистского электрона. Собственные значения есть

$$E_{s,n} = s \cdot \varepsilon_n = s \sqrt{m^2 c^4 + 2\hbar e B c n} \quad (1.12)$$

с $n = 1, 2, 3, \dots$ для $s = 1$ и $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ для $s = -1$. Соответствующие собственные функции

$$\psi_{\lambda_k=1,s=1,n}(y) = \begin{pmatrix} d_n \phi_{n-1}(y - y_c) \\ -b_n \phi_n(y - y_c) \end{pmatrix}, \quad (1.13)$$

$$\psi_{\lambda_k=1,s=-1,n}(y) = \begin{pmatrix} b_n \phi_{n-1}(y - y_c) \\ d_n \phi_n(y - y_c) \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

где $\phi_n(y - y_c)$ – волновые функции линейного осциллятора, а коэффициенты d_n и b_n записываются в виде

$$d_n = \sqrt{\frac{\varepsilon_n + mc^2}{2\varepsilon_n}}, \quad b_n = \sqrt{\frac{\varepsilon_n - mc^2}{2\varepsilon_n}}. \quad (1.15)$$

Двухкомпонентная волновая функция для $\lambda_k = -1$ удовлетворяет уравнению Дирака

$$\begin{pmatrix} mc^2 & -\sqrt{2\hbar ec} B \hat{a}^\dagger \\ -\sqrt{2\hbar ec} B \hat{a} & -mc^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f(y) \\ \chi(y) \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} f(y) \\ \chi(y) \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Энергетический спектр $E_{s,n}$ определяется уравнением (1.12), но теперь $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ для $s = 1$ и $n = 1, 2, 3, \dots$ для $s = -1$. Соответствующие собственные функции

$$\psi_{\lambda_k=-1,s=1,n}(y) = \begin{pmatrix} d_n \phi_n(y - y_c) \\ -b_n \phi_{n-1}(y - y_c) \end{pmatrix}, \quad (1.17)$$

$$\psi_{\lambda_k=-1,s=-1,n}(y) = \begin{pmatrix} b_n \phi_n(y - y_c) \\ d_n \phi_{n-1}(y - y_c) \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

Заметим, что в рассматриваемом случае с $p_z = 0$ четырехкомпонентная волновая функция $U(y)$ связана с двухкомпонентными волновыми функциями $\psi_{\lambda,s,n}(y)$ соотношениями

$$U_{\lambda_k=1,s,n}(y) = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & 0 \\ 0 & |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \psi_{\lambda=1,s,n}(y), \quad (1.19)$$

$$U_{\lambda_k=-1,s,n}(y) = \begin{pmatrix} |\downarrow\rangle & 0 \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \psi_{\lambda=-1,s,n}(y). \quad (1.20)$$

Таким образом, в рассматриваемом случае (с $p_z = 0$) полное решение записывается в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int dp \varphi_p(x) \sum_{n,s,\lambda_k} C_{n,\lambda_k}^s(p) U_{\lambda_k,s,n}(y) \exp(-is\varepsilon_n t/\hbar), \quad (1.21)$$

где $\varphi_p(x) = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \exp(ipx/\hbar)$, а коэффициенты $C_{n,\lambda_k}^s(p)$ определяются из начальной волновой функции.

1.1.2 Эволюция релятивистского волнового пакета, состоящего из стационарных состояний, отвечающих энергиям одного знака

1.1.2.1 Временная зависимость электронной плотности вероятности

Для изучения сложной динамики реального релятивистского электрона в магнитном поле можно собрать начальный мезоскопический волновой пакет из суперпозиции состояний только с положительными энергиями. Кроме того, будем рассматривать специальную форму начальной волновой функции, которая представляет собой когерентное состояние нерелятивистского электрона в магнитном поле. Тогда коэффициенты $C_{n,\lambda_k}^s(p)$ в (1.21) можно выбрать в виде

$$C_{n \geq 0, \lambda_k = -1}^{s=1}(p) = \frac{\beta g(p) c_{n+1}}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}, \quad C_{n \geq 1, \lambda_k = 1}^{s=1}(p) = \frac{\alpha g(p) c_n}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}, \quad C_{n, \lambda_k}^{s=-1}(p) = 0, \quad (1.22)$$

где α и β определяют вклад в начальный волновой пакет состояний с $\lambda_k = 1$ и $\lambda_k = -1$ соответственно,

$$g(p) = \sqrt{\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(pa/\hbar - qa)^2\right), \quad (1.23)$$

$$c_n = \frac{\exp(-(qa)^2/4) \cdot (-qa)^{n-1}}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)!}}, \quad (1.24)$$

$a = \sqrt{\hbar c/eB}$ – магнитная длина, параметр $qa \sim \sqrt{n_0}$ характеризует радиус релятивистской орбиты. Нетрудно показать (см. Приложение А), что коэффициенты $|c_n|^2$ в случае, когда $n \gg 1$ могут быть аппроксимированы распределением

Гаусса со средним значением $\bar{n} = n_0$. Для удобства будем считать, что $\alpha = \alpha^*$, $\beta = \beta^*$. Тогда из выражения (1.21) имеем:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \int dp \varphi_p(x) g(p) \times \\ & \times \left[\sum_{n=1} \left(\begin{array}{l} d_n(\alpha c_n \phi_{n-1}(y) | \uparrow \rangle + \beta c_{n+1} \phi_n(y) | \downarrow \rangle) \\ -b_n(\alpha c_n \phi_n(y) | \downarrow \rangle + \beta c_{n+1} \phi_{n-1}(y) | \uparrow \rangle) \end{array} \right) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} + \right. \\ & \left. + \beta c_1 \left(\begin{array}{l} \phi_0(y) | \downarrow \rangle \\ 0 \end{array} \right) e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Здесь важно отметить, что все компоненты волновой функции отличны от нуля. Поэтому для описания динамики волнового пакета необходимо работать с полным гамильтонианом (1.1). Для анализа движения центра волнового пакета в первую очередь удобно вычислить среднее значение оператора скорости $\hat{V}_i = c\alpha_i$. Из формул (1.23), (1.24), (1.25) после интегрирования по x и по y получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} \bar{v}_x(t) + i\bar{v}_y(t) = & \frac{ce^{-(qa)^2/2}}{\alpha^2 + \beta^2} \sum_{n=0} \frac{(qa)^{2n+1}}{2^n n!} \sqrt{\frac{\varphi_{n+1} - 1}{2(n+1)\varphi_{n+1}}} \times \\ & \times \left(\alpha^2 \sqrt{\frac{\varphi_{n+2} + 1}{\varphi_{n+2}}} e^{i(\varphi_{n+2} - \varphi_{n+1})\tau} + \beta^2 \sqrt{\frac{\varphi_n + 1}{\varphi_n}} e^{i(\varphi_{n+1} - \varphi_n)\tau} \right). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Здесь и далее φ_n – энергия электрона (в единицах mc^2):

$$\varphi_n = \sqrt{1 + 2n(\lambda/a)^2}, \quad (1.27)$$

$\tau = ct/\lambda$, где $\lambda = \hbar/mc$ – комптоновская длина волны. Можно показать, что наибольший вклад в сумму в уравнении (1.26) дают слагаемые из интервала в окрестности $n \approx n_0 = (qa)^2/2$. Как следует из выражения (1.27), в случае $n(\lambda/a)^2 \ll 1$ $\varphi_n \approx 1 + n(\lambda/a)^2$. Тогда формула (1.26) описывает циклотронное движение нерелятивистского электрона

$$\bar{v}_x(t) = \frac{\hbar q}{m} \cos \omega t, \quad \bar{v}_y(t) = \frac{\hbar q}{m} \sin \omega t. \quad (1.28)$$

Если значение n_0 достаточно велико, то квантовая интерференция компонент волнового пакета приведет к различным типам периодичности. На рис.1.1 представлена зависимость $\bar{v}_x(t)$ для релятивистского волнового пакета с параметрами $qa = 5$, $\alpha = \beta$ в магнитном поле с напряженностью $B \simeq 4,5 \cdot 10^7$ Т. (Отметим, что такие магнитные поля в 1,5 раза больше максимального значения, достигнутого до настоящего времени в лабораторных экспериментах). В этом случае $\varphi_{n+1} - \varphi_n \approx \varphi'_{n_0} + (\varphi''_{n_0}/2)(2n - 2n_0 + 1)$. Таким образом, на начальном этапе средняя скорость центра волнового пакета осциллирует с классическим периодом циклотронного движения

$$T_{cl} = \frac{2\pi\hbar}{mc^2\varphi'_{n_0}} = \frac{2\pi\varphi_{n_0}}{\omega_c}, \quad \omega_c = \frac{eBc}{\varepsilon_{n_0}}. \quad (1.29)$$

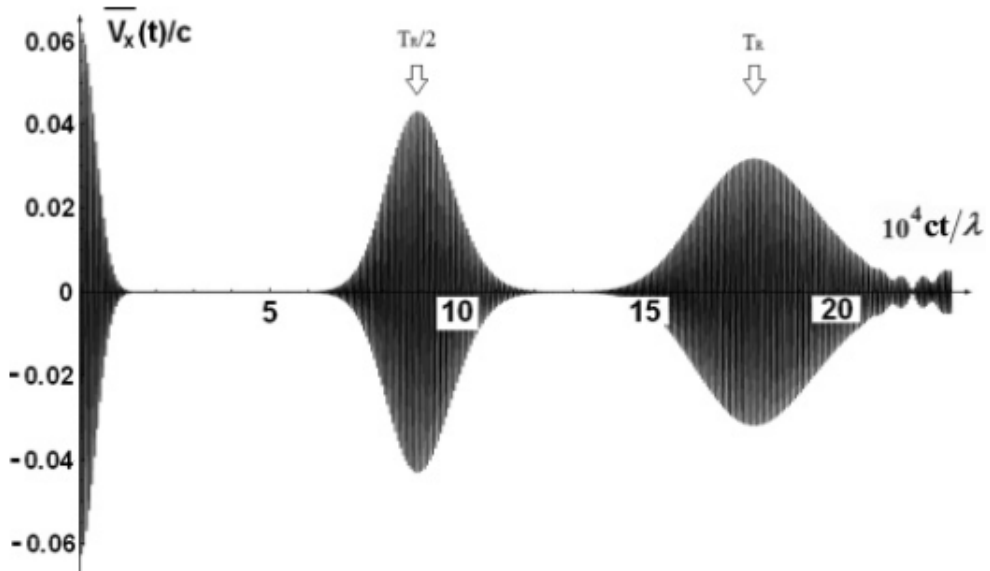


Рисунок 1.1: Зависимость средней скорости $\bar{v}_x(t)$ от времени для начального волнового пакета (1.25) при $\alpha = \beta$ и параметрами $\lambda/a = 0,1$, $qa = 5$ (что соответствует значению $n = n_0 \approx 13$ и дисперсии $\Delta n \sim \sqrt{n_0} \approx 3,5$).

При бóльших временах $t > T_D$ эти осцилляции угаснут, но затем возродятся вновь. Время затухания T_D можно оценить из выражения (A.4). Для случая $|\varphi''_{n_0}|\tau \ll 1$ амплитуда осцилляций пропорциональна $\exp(-(qa\varphi''_{n_0}\tau/2)^2) = \exp(-t^2/T_D^2)$, где

$$T_D = \frac{2\lambda}{qac|\varphi''_{n_0}|} = \frac{2\hbar}{qa|\varepsilon''_{n_0}|}. \quad (1.30)$$

При временах $T_D < t < T_R/2$ компоненты средней скорости, так же как средние координаты центра волнового пакета, близки к нулю. При $t \sim T_R/2$ (см. рис.1.1)

осцилляции средней скорости возобновятся вновь. Здесь T_R – время возрождения, при котором волновой пакет полностью восстанавливается [1]. В моменты времени $t_k = kT_R$ (где k – целое число) нелинейные (квадратичные) слагаемые в разложении φ_n не играют роли, так что

$$T_R = \frac{4\pi\lambda}{c|\varphi''_{n_0}|} = \frac{4\pi\hbar}{|\varepsilon''_{n_0}|}. \quad (1.31)$$

Отметим, что момент $T_R/2$ – время, когда волновой пакет возрождается первый раз. Для рассматриваемых параметров волнового пакета из (1.30) и (1.31) нетрудно получить отношение $T_R/T_D \sim 30$, что отлично согласуется с результатом численного расчета (см. рис.1.1).

Далее рассмотрим некоторые особенности пространственно-временной динамики электронного волнового пакета (1.25). Проведя интегрирование в выражении (1.25) по импульсу p , получим

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) = \frac{M(\rho, \theta)}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sum_{n=0} \left[\frac{\gamma^{n-1}}{(n-1)!} (1 - \delta_{n,0}) e^{i\theta} \left(\alpha d_n, 0, \frac{\beta b_n q a}{\sqrt{2n}}, -\frac{\alpha b_n \rho}{\sqrt{2n}} e^{-i\theta} \right)^T + \right. \\ \left. + \frac{\gamma^n}{n!} \beta d_n (0, 1, 0, 0)^T \right] e^{-i\theta n - i\varphi_n c t / \lambda}. \quad (1.32) \end{aligned}$$

Детали расчета приведены в Приложении В. Здесь введены следующие обозначения:

$$\frac{x}{a} = \rho \sin \theta, \quad \frac{y - qa^2}{a} = \rho \cos \theta, \quad \gamma = -\frac{qa\rho}{2}, \quad (1.33)$$

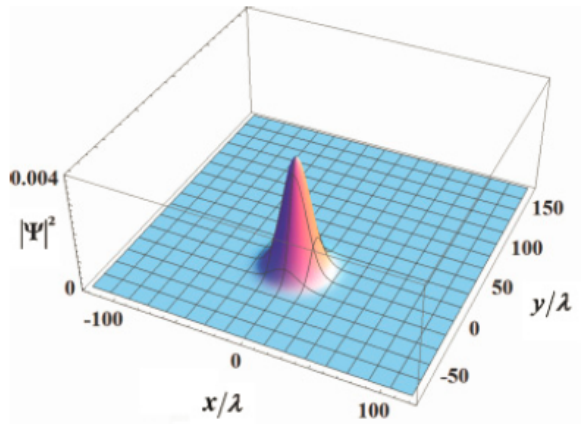
$$M(\rho, \theta) = \frac{\exp\left(-\frac{\rho^2 + (qa)^2}{4} + \frac{i\rho \sin \theta (\rho \cos \theta + 2qa)}{2}\right)}{a\sqrt{2\pi}}. \quad (1.34)$$

На рис.1.2 представлена временная эволюция плотности вероятности $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$, рассчитанная с помощью выражений (1.32), (1.33) и (1.34).

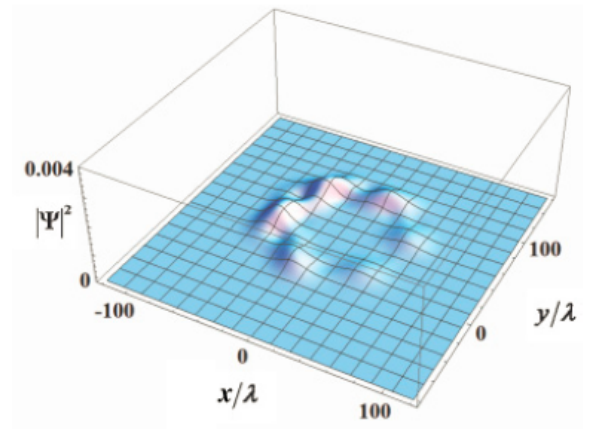
На начальном этапе (при $t \ll T_D$) движение волнового пакета определяется линейным слагаемым в разложении φ_n (см. (A.2)). В этом приближении

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{cl}(\mathbf{r}, t), \quad (1.35)$$

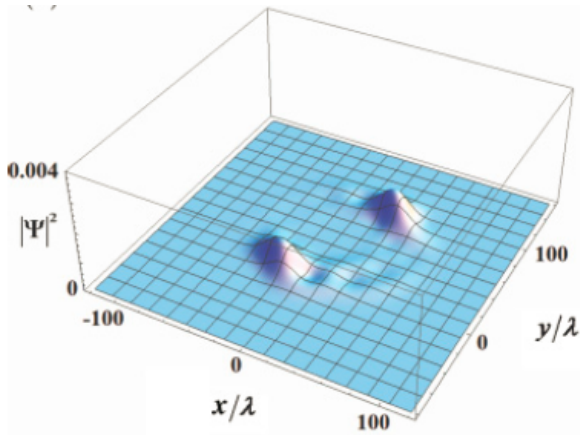
где $\psi_{cl}(\mathbf{r}, t)$ определяется выражением (B.4). Как было отмечено выше, в рассматриваемом случае значение $2n_0(\lambda/a)^2 \simeq (q\lambda)^2 = 0,25$ таково, что $\psi_{cl}(\mathbf{r}, t)$



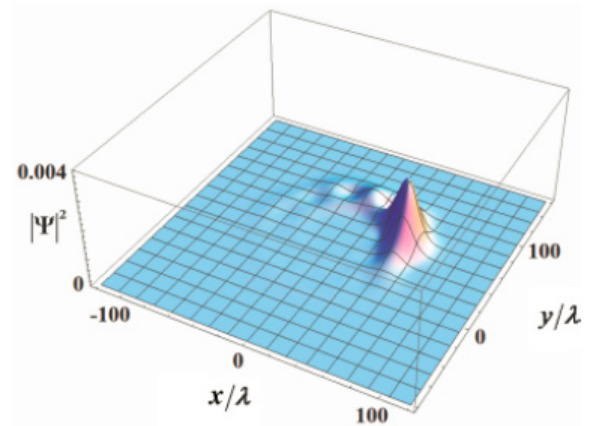
(a)



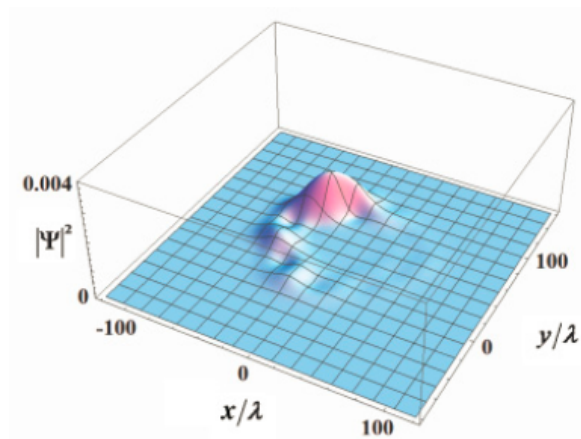
(b)



(c)



(d)



(e)

Рисунок 1.2: Плотность вероятности для волнового пакета (1.25) при $\alpha = \beta$ и параметрами $\lambda/a = 0,1$, $qa = 5$ в моменты времени: (a) $t = 0$; (b) $t \approx T_D$; (c) $t \approx T_R/4$; (d) $t \approx T_R/2$; (e) $t \approx T_R$.

слабо отличается от когерентной волновой функции нерелятивистского электрона (см. выражение (B.4)). Поэтому форма волнового пакета $|\psi_{cl}(\mathbf{r}, t)|^2$ остается неизменной во время его циклотронного движения (уравнение (B.6)) с классическим периодом $T_{cl} \sim 10^{-18}$ с.

Однако, через несколько оборотов при $t \sim T_D$ (см. рис.1.2(b)) квадратичные слагаемые в разложении φ_n становятся существенными, что приводит к дефазировке различных слагаемых в суперпозиции (1.32). В результате, волновой пакет распадается на целый ряд подпакетов. Как было ранее показано Авербухом и Перельманом [1], при $t \approx mT_R/n$ (m и n – взаимно простые числа), число таких подпакетов равно $N = n(3 - (-1)^n)/4$. Первое восстановление волнового пакета произойдет в момент времени $t_1 = T_R/2$, где время возрождения T_R определено в (1.31) и для рассматриваемых нами параметров равно $T_R \approx 2,3 \cdot 10^{-16}$ с. При этом n -е слагаемое в суперпозиции (1.32) приобретает фазовый множитель $f_k = e^{i\pi k^2} = e^{i\pi k}$, $k = n - n_0$, что в результате приводит к волновой функции пакета (см. рис.1.2(d))

$$\psi(\mathbf{r}, t_1) = \psi_{cl}\left(\mathbf{r}, t_1 + \frac{T_{cl}}{2}\right). \quad (1.36)$$

Важно отметить, что (в соответствии с выражением (B.7)) положение возрожденного пакета в моменты $T_R/2$ и T_R не совпадает с его начальным положением при $t = 0$. На ранних временах, например при $t_2 = T_R/4$, исходный волновой пакет распадется на два подпакета (дробное возрождение). В этом случае дополнительный фазовый множитель $f_k = e^{i\pi k^2}$ есть периодическая функция $f_k = f_{k+2}$, поэтому удобно использовать стандартное преобразование Фурье

$$f_k = a_0 + a_1 e^{i\pi k}, \quad k = 0, 1, \quad (1.37)$$

$$a_0 = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}}, \quad a_1 = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}. \quad (1.38)$$

Затем, подставляя (1.37) и (1.38) в (1.34), можно получить

$$\psi(\mathbf{r}, t_2 = T_R/4) = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}}\psi_{cl}(\mathbf{r}, t_2) + \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}\psi_{cl}(\mathbf{r}, t_2 + T_{cl}/2). \quad (1.39)$$

Отметим, что вследствие выражений (B.7) и (1.39) угловое расстояние между этими двумя пакетами равно π (см. рис.1.2(c)). Подобные структуры, состоящие из N подпакетов, равномерно распределенных по классической орбите, образу-

ются также при других временах дробного возрождения. Однако, следует отметить, что эффекты дробного возрождения не проявляются в зависимости средней скорости от времени (см. рис.1.1). Форма волнового пакета в момент времени $t = T_R$ (см. рис.1.2(е)) отличается от первоначальной (рис.1.2(а)). Расплывание пакета при $t = T_R$ связано со следующим (кубическим) слагаемым в разложении φ_n .

Особенности квантовой динамики релятивистских волновых пакетов, описанных выше, могут проявиться в характере электромагнитного излучения от движущихся электронов. Как поле излучения, так и его интенсивность определяются мультипольным моментом системы. Таким образом, на начальной стадии эволюции волнового пакета ($t < T_D$) преобладает дипольное излучение с частотой $\omega = \omega_c = eBc/\varepsilon_{n_0}$. Его интенсивность (в классическом приближении) пропорциональна второй производной по времени от среднего дипольного момента $\ddot{\mathbf{d}}(t) = -e\dot{\mathbf{v}}(t)$, где компоненты средней скорости определены формулой (1.26). На временном интервале $T_D < t < T_R/2$ средняя скорость пакета практически равна нулю (рис.1.1). В течение этого времени электромагнитное излучение определяется как зависящими от времени компонентами тензора квадрупольного момента

$$\bar{D}_{\alpha,\beta} = \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 (3x_\alpha x_\beta - \mathbf{r}^2 \delta_{\alpha,\beta}) d\mathbf{r}, \quad (1.40)$$

так и магнитного момента

$$\bar{\mathbf{m}} = \frac{1}{2c} \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{v}}] \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (1.41)$$

где волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ определена выражениями (1.32) – (1.34). В частности, в момент времени $t = T_R/4$, когда начальный волновой пакет распадается на два подпакета, преобладает квадрупольное излучение на удвоенной частоте $2\omega_c$, что подтверждается численными расчетами интенсивности излучения вдоль направления вектора \mathbf{n} : $dI/d\Omega = \frac{1}{4}\pi c^5 \left[\ddot{\mathbf{D}}, \mathbf{n} \right]^2$. На временном интервале $\Delta t \sim 2T_D$ вблизи момента $t \sim T_R/2$ (см. рис.1.1) дипольное излучение становится снова доминирующим. Затем, в последующие моменты времени мультипольное и магнито-дипольное слагаемые вновь начинают преобладать, и т.д.

1.1.2.2 Спиновая динамика

Рассмотрим спиновую динамику электронного волнового пакета (1.25) в магнитном поле $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Хорошо известно, что в нерелятивистской квантовой механике спин электрона прецессирует в плоскости (x, y) с циклотронной частотой $\omega = eB/mc$, так что его S_z -компонента остается постоянной. Оператор спина для дираковской частицы

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\Sigma_i = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (1.42)$$

не коммутирует с гамильтонианом Дирака (1.1). Это означает, что кроме обычной спиновой прецессии, которая является более сложной в релятивистском случае, S_z -компонента с течением времени в принципе может изменяться. Однако, среднее значение компоненты S_z сохраняется для волнового пакета, содержащего состояние только с $E_n > 0$ или с $E_n < 0$. Это непосредственно следует из того, что коммутатор $[\hat{S}_z, \hat{H}]$ равен нулю в подпространстве собственных функций гамильтониана Дирака для энергии того же знака. Рассматриваемый волновой пакет (1.25) удовлетворяет этому условию. Таким образом, необходимо найти лишь временную зависимость средних $\bar{S}_x(t)$ и $\bar{S}_y(t)$:

$$\bar{S}_{x,y}(t) = \frac{\hbar}{2} \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \Sigma_{x,y} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.43)$$

где $\Psi(\mathbf{r}, t)$ определена выражением (1.25). Оказывается удобным представить результаты расчетов в комплексной форме

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_x(t) + i\bar{\Sigma}_y(t) &= \frac{\alpha\beta}{\alpha^2 + \beta^2} e^{-(qa)^2/2} \sum_{n=0} \frac{((qa)^2/2)^n}{n!} \times \\ &\times \left(\sqrt{\frac{(\varphi_n + 1)(\varphi_{n+1} + 1)}{\varphi_n \varphi_{n+1}}} + \sqrt{\frac{n(\varphi_n - 1)(\varphi_{n+1} - 1)}{(n+1)\varphi_n \varphi_{n+1}}} \right) e^{ict(\varphi_{n+1} - \varphi_n)/\lambda}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Зависимость $\bar{S}_x(t)$ представлена на рис.1.3 и подобна поведению компоненты средней скорости $\bar{v}_x(t)$ (см. рис.1.1). Кроме того, можно утверждать, что обычная прецессия наблюдается только в течение нескольких периодов T_{cl} . При временах $t \lesssim T_D$ вращение спина прекращается и возобновится вновь при $t \lesssim T_R/2$. Отметим, что прецессия спина электрона, движущегося в однородном магнит-

ном поле, тесно связана с сохранением спиральности $\Sigma_i \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c)_i$. Также заметим, что, как следует из формулы (1.44), средние значения компонент спина $\bar{\Sigma}_x = \bar{\Sigma}_y = 0$, если электронный волновой пакет представляет собой суперпозицию состояний только с $\lambda_k = 1$ или только с $\lambda_k = -1$.

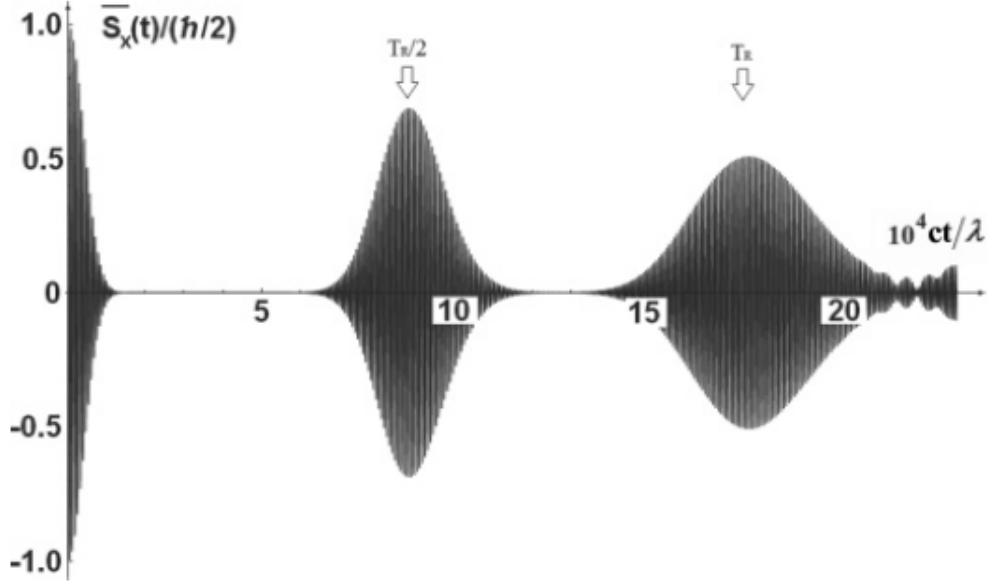


Рисунок 1.3: Зависимость $\bar{S}_x(t)$ от времени для электронного волнового пакета (1.25) с параметрами $\lambda/a = 0,1$, $qa = 5$.

Теперь рассмотрим спиновые плотности, определяемые как $\langle S_{x,y}(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Sigma_{x,y}(\mathbf{r}, t) \rangle$, где

$$\langle \Sigma_{x,y}(\mathbf{r}, t) \rangle = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \Sigma_{x,y} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.45)$$

Используя выражение для волновой функции (1.25), можно найти из (1.45) $\langle \Sigma_x(\mathbf{r}, t) \rangle$ и $\langle \Sigma_y(\mathbf{r}, t) \rangle$ как реальную и мнимую части выражения

$$\begin{aligned} \langle \Sigma_x(\rho, \theta, t) \rangle + i \langle \Sigma_y(\rho, \theta, t) \rangle &= \frac{\alpha\beta e^{-((qa)^2 + \rho^2)/2}}{2\pi a^2(\alpha^2 + \beta^2)} \sum_{m,n=0} \frac{(-qa\rho/2)^{n+m}}{n!m!} \times \\ &\times \left(\sqrt{\frac{(\varphi_{m+1} + 1)(\varphi_n + 1)}{\varphi_n \varphi_{m+1}}} + \sqrt{\frac{n(\varphi_n - 1)(\varphi_{m+1} - 1)}{(m+1)\varphi_n \varphi_{m+1}}} \right) \times \\ &\times \exp(ict(\varphi_{m+1} - \varphi_n)/\lambda + i\theta(m - n)). \quad (1.46) \end{aligned}$$

На рис.1.4 и рис.1.5 представлены распределения $\langle \Sigma_x(\rho, \theta, t) \rangle$ и $\langle \Sigma_y(\rho, \theta, t) \rangle$ в те же самые моменты времени, что на рис.1.2, то есть при $t = 0, T_R/4, T_R/2, T_R$. Как и для электронной плотности вероятности, при $t \lesssim T_R$ в первом прибли-

жении пространственно-временная эволюция спиновой плотности определяется волновой функцией $\psi_{cl}(\mathbf{r}, t)$ (формула (B.4)), что соответствует «классическому» движению электрона. Поэтому можно определить функции ($\alpha = \beta$) как

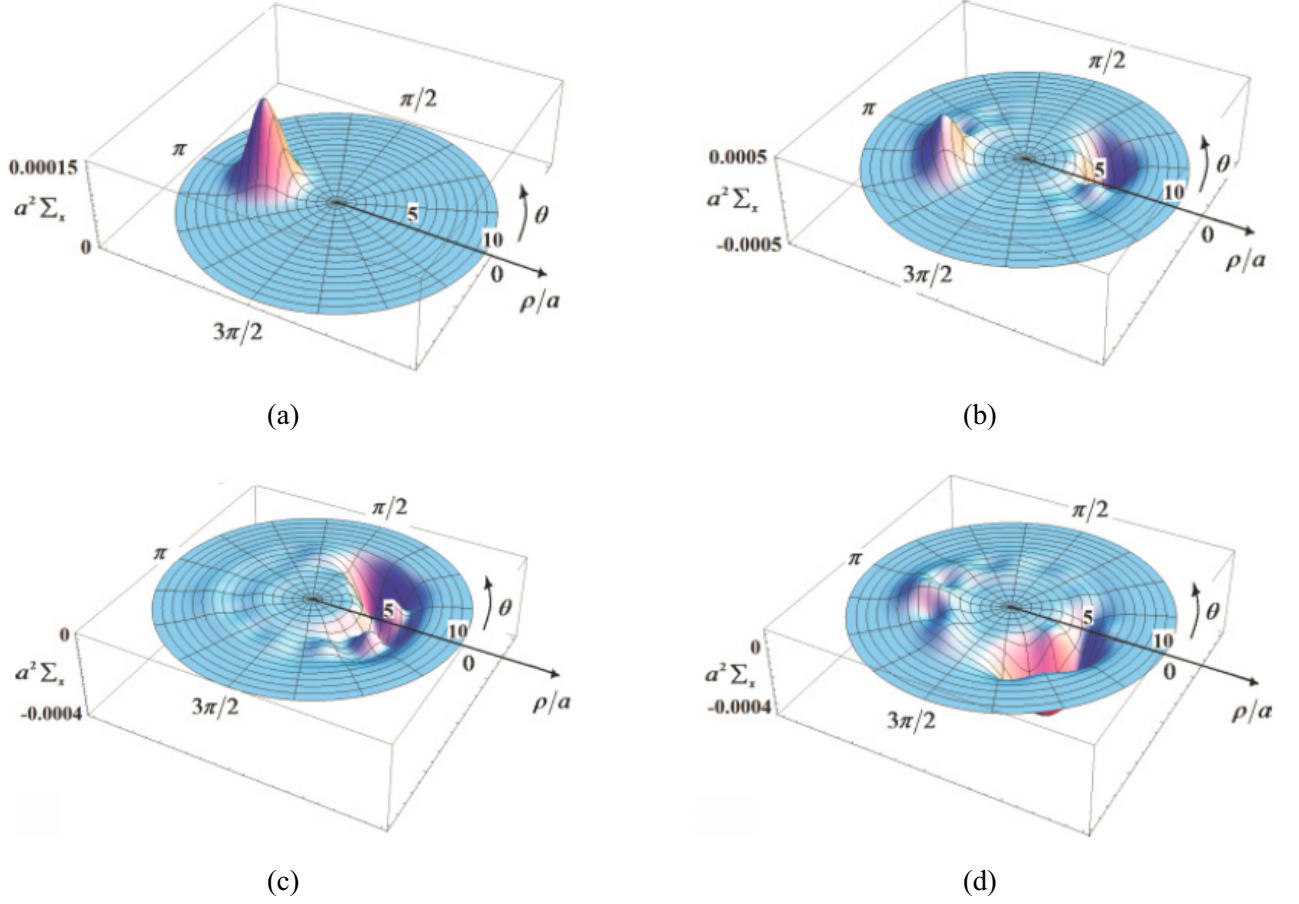


Рисунок 1.4: Распределение спиновой плотности $\langle \Sigma_x(\rho, \theta, t) \rangle$ для волнового пакета (1.25) с параметрами $\lambda/a = 0,1$, $qa = 5$ в моменты времени: (a) $t = 0$; (b) $t \approx T_R/4$; (c) $t \approx T_R/2$; (d) $t \approx T_R$.

$$\begin{aligned} \langle \Sigma_x^{cl}(\rho, \theta, t) \rangle = \exp\left(-\frac{\rho^2 + (qa)^2 + 2\rho qa \cos(\theta + 2\pi t/T_c)}{2}\right) \times \\ \times \left(\cos \frac{2\pi t}{T_c} - \frac{\lambda^2}{4a^2}(qa\rho) \cos \theta\right)/(2\pi a^2), \quad (1.47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Sigma_y^{cl}(\rho, \theta, t) \rangle = \exp\left(-\frac{\rho^2 + (qa)^2 + 2\rho qa \cos(\theta + 2\pi t/T_c)}{2}\right) \times \\ \times \left(\sin \frac{2\pi t}{T_c} + \frac{\lambda^2}{4a^2}(qa\rho) \sin \theta\right)/(2\pi a^2). \quad (1.48) \end{aligned}$$

Из этих выражений видно, что при $t = 0$ x -компонента спиновой плотности как функция угловой переменной θ имеет максимум при $\theta_0 = \pi$, рис.1.4(a). Максимальное и минимальное значения функции $\langle \Sigma_y(\rho, \theta, 0) \rangle$ также находятся в окрестности этой точки и отличаются знаком (см. рис.1.5(a)). В момент времени $t_2 = T_R/4$, как было показано выше, мы имеем два «классических» волновых пакета (выражение (1.39) и рис.1.2(c)). Соответственно,

$$\langle \Sigma_{x,y}(\rho, \theta, t_2) \rangle = \frac{1}{2}(\langle \Sigma_{x,y}^{cl}(\rho, \theta, t_2) \rangle + \langle \Sigma_{x,y}^{cl}(\rho, \theta, t_2 + T_{cl}/2) \rangle), \quad (1.49)$$

что иллюстрируется рис.1.4(b) и рис.1.5(b). Отметим, что простое суммирование в (1.49) справедливо только в случае, когда ширина каждого из волновых пакетов меньше, чем длина циклотронной орбиты.

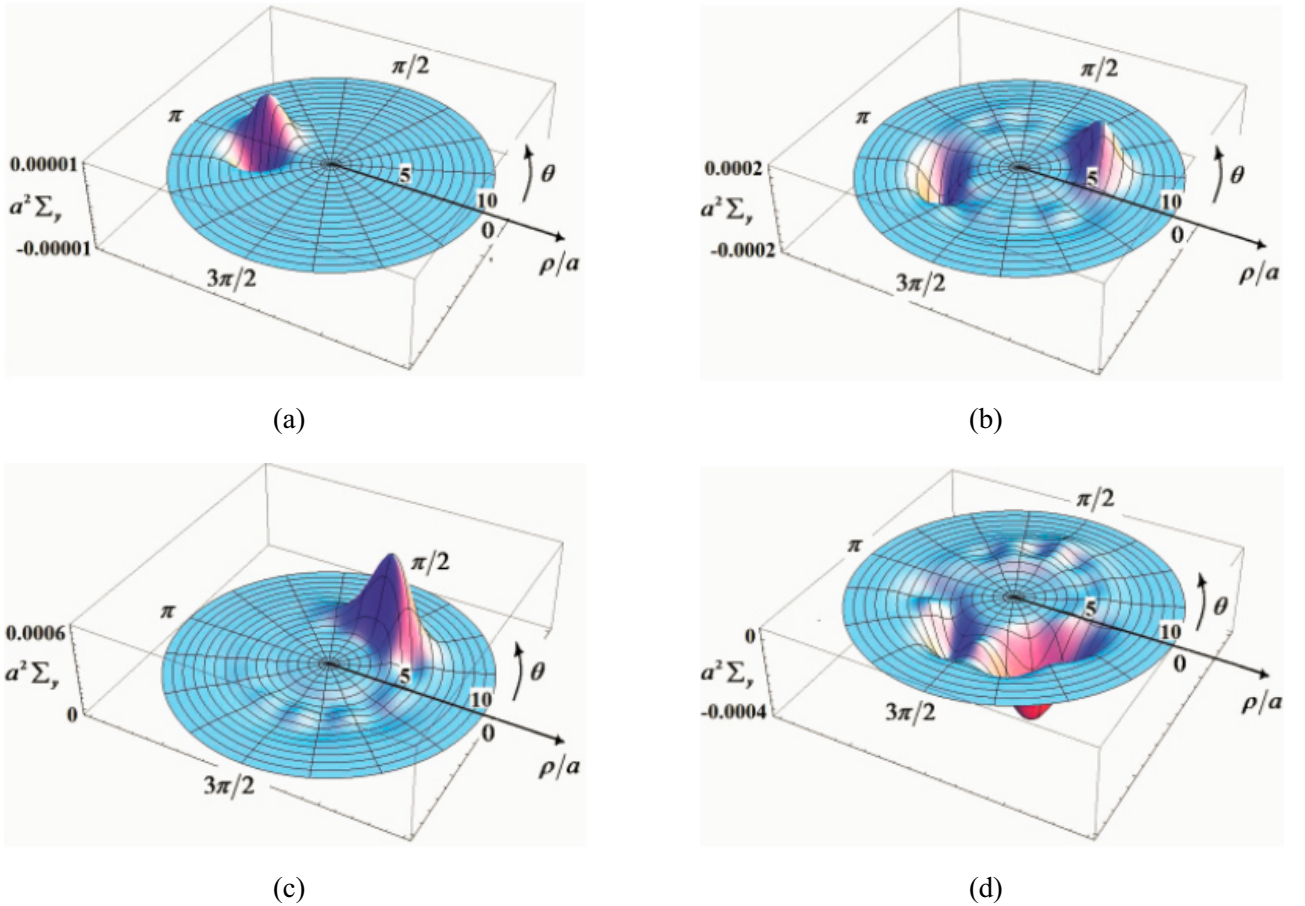


Рисунок 1.5: Распределение спиновой плотности $\langle \Sigma_y(\rho, \theta, t) \rangle$ для волнового пакета (1.25) с параметрами $\lambda/a = 0,1$, $qa = 5$ в моменты времени: (a) $t = 0$; (b) $t \approx T_R/4$; (c) $t \approx T_R/2$; (d) $t \approx T_R$.

1.1.3 Пространственно-временная динамика мезоскопических волновых пакетов, содержащих состояния, отвечающие как положительным, так и отрицательным энергиям

Рассмотрим релятивистскую динамику волнового пакета, содержащего как положительные, так и отрицательные энергии с $\lambda_k = 1$. Соответственно, мы ограничимся состояниями с отличными от нуля компонентами $\{\psi_1, \psi_4\}$. Временная динамика таких состояний регулируется частью гамильтониана Дирака, которая идентична взаимодействию Джейнса-Каммингса. Помимо общих закономерностей квантовой динамики систем с нелинейным энергетическим спектром (явление коллапса и возрождения) наличие двух энергетических зон приводит к дополнительному эффекту — ZB. Это явление, связанное с высокочастотной осцилляцией, обусловлено интерференцией между компонентами волнового пакета с положительными и отрицательными энергиями. Будем рассматривать эффект ZB как при эволюции средней скорости, так и спиновой поляризации.

Пусть в начальный момент времени $\tau = 0$ волновой пакет описывается волновой функцией вида

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_c(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

где

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4a^2} + iqy + \frac{ixy}{2a^2}\right) \quad (1.51)$$

является волновой функцией когерентного состояния нерелятивистского электрона, которая может быть записана в форме

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \int dp \varphi_p(x) g(p) \sum_{n=0} c_{n+1} \phi_n(y - y_c). \quad (1.52)$$

Коэффициенты $g(p)$ и c_n в этом выражении определены в (1.23) и (1.24). Из формул (1.21), (1.50) и (1.52) можно получить

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, \tau) = \int dp \varphi_p(x) g(p) \sum_{n=1} \left[d_n \begin{pmatrix} d_n \phi_{n-1}(y - y_c) |\uparrow\rangle \\ -b_n \phi_n(y - y_c) |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \exp(-i\varphi_n \tau) + \right. \\ \left. + b_n \begin{pmatrix} b_n \phi_{n-1}(y - y_c) |\uparrow\rangle \\ d_n \phi_n(y - y_c) |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \exp(i\varphi_n \tau) \right]. \quad (1.53) \end{aligned}$$

После интегрирования по p (см. формулу (B.3) в Приложении B)) в итоге имеем

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \Psi_1(\mathbf{r}, \tau) \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_2(\mathbf{r}, \tau) \begin{pmatrix} 0 \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix}, \quad (1.54)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_1(\mathbf{r}, \tau) = & \psi_c(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{q}{2}(qa^2 - y + ix)\right) \times \\ & \times \sum_{n=1} \frac{(q(qa^2 - y + ix))^{n-1}}{2^{n-1}(n-1)!} \left(\cos(\varphi_n \tau) - \frac{i \sin(\varphi_n \tau)}{\varphi_n} \right), \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} \Psi_2(\mathbf{r}, \tau) = & -\psi_c(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{q}{2}(qa^2 - y + ix)\right) \times \\ & \times \sum_{n=1} \frac{(q(qa^2 - y + ix))^{n-1}}{2^{n-1}(n-1)!} \frac{i \lambda \sin(\varphi_n \tau)}{a^2 \varphi_n} (qa^2 - y + ix). \end{aligned} \quad (1.56)$$

Как и ранее, сначала вычислим среднюю скорость центра пакета

$$\bar{v}_i(t) = c \int \psi^\dagger \hat{\sigma}_i \psi \, d\mathbf{r}. \quad (1.57)$$

Подставив выражения для компонент волновой функции (1.55), (1.56) в (1.57), после интегрирования по координатам x и y получим

$$\begin{aligned} \bar{v}_x(\tau) = & c \frac{\lambda}{a} \exp\left(-\frac{(qa)^2}{2}\right) \sum_{n=1} \frac{(qa)^{2n-1}}{2^{n-1}(n-1)! \varphi_n \varphi_{n+1}} \times \\ & \times \left(\cos((\varphi_{n+1} - \varphi_n)\tau) - \cos((\varphi_{n+1} + \varphi_n)\tau) \right), \end{aligned} \quad (1.58)$$

$$\begin{aligned} \bar{v}_y(\tau) = & c \frac{\lambda}{a} \exp\left(-\frac{(qa)^2}{2}\right) \sum_{n=1} \frac{(qa)^{2n-1}}{2^{n-1}(n-1)! \varphi_n} \times \\ & \times \left(\sin((\varphi_{n+1} - \varphi_n)\tau) - \sin((\varphi_{n+1} + \varphi_n)\tau) \right). \end{aligned} \quad (1.59)$$

Отметим, что эти выражения содержат не только разность энергий $\varphi_{n+1} - \varphi_n$, как в (1.26), но также сумму $\varphi_{n+1} + \varphi_n$, что приводит к высокочастотным ZB-осцилляциям. Зависимость средней скорости $\bar{v}_x(\tau)$ от времени для пакета с параметрами $\lambda/a = 0,5$ и $qa = 10$ (что соответствует основному вкладу уров-

ней с $n = n_0 \simeq 50$) представлена на рис.1.6. Подобно уже рассмотренному случаю волнового пакета, содержащего состояния только одной энергетической зоны, поведение этой функции сопровождается явлениями коллапса и возрождения. Для параметров рассматриваемого волнового пакета соответствующие периоды циклотронного движения и возрождения есть $T_{cl} \approx 126\lambda/c$ и $T_R \approx 26660\lambda/c$. Во вставке на рис.1.6 явно видно ZB-осцилляции с частотой $\omega_{ZB} = 2\varphi_{n_0}c/\lambda = 10,2c/\lambda \simeq 7,85 \cdot 10^{21} \text{ с}^{-1}$. Более того, эти осцилляции совершаются за короткие промежутки времени $t_k = kT_{cl}/2$ ($k = 1, 2, \dots$), что связано с особенностью пространственно-временной эволюции распределения плотности вероятности волнового пакета. При $t > 0$ начальный волновой пакет (рис.1.7(a)) расщепляется на две части (рис.1.7(b)) со слабо отличающимися амплитудами. Эти подпакеты, содержащие состояния с энергией одного знака, вращаются с циклотронной частотой в противоположных направлениях, и встречаются друг с другом дважды за период (см. рис.1.7(c), 1.7(d)). Длительность ZB-осцилляций определяется отношением ширины пакетов к их относительной скорости. Заметим, что в момент времени $t = T_{cl}/4$ спиновые части подпакетов с $E_n > 0$ и $E_n < 0$ слабо отличаются друг от друга. Так, пространственная часть полной волновой функции (1.53) представляет собой суперпозицию мезоскопических состояний (см. Приложение С). При $t \sim t_k$ части с положительной и отрицательной энергиями значительно перекрываются в координатном пространстве. Это необходимое условия существования ZB (см. вставку на рис.1.6).

В моменты времени $t \sim T_{cl}$ влияние квадратичных слагаемых в разложении φ_n (формула (A.2)) незначительно. Для времен, много бóльших циклотронного периода, у отдельных слагаемых в (1.53) из-за члена $(n - n_0)^2$ появляется дефазировка, которая приводит к коллапсу подпакетов. На промежуточных временах $T_{cl} \ll t_n \leq T_R$, где $t_n \approx mT_R/n$ (m/n – неприводимая дробь) наступает дробное возрождение каждого подпакета. В результате каждый подпакет распадется на $N = n(3 - (-1^n))/4$ пакетов-фракций. В частности, при $t = T_R$ каждый из двух подпакетов (с положительной или отрицательной энергией) восстанавливается в различных точках циклотронной орбиты, что делает невозможным полное восстановление формы первоначального пакета. Так, в момент времени $T_R/4$ мы можем наблюдать четыре пакета-фракции. Однако, это утверждение не

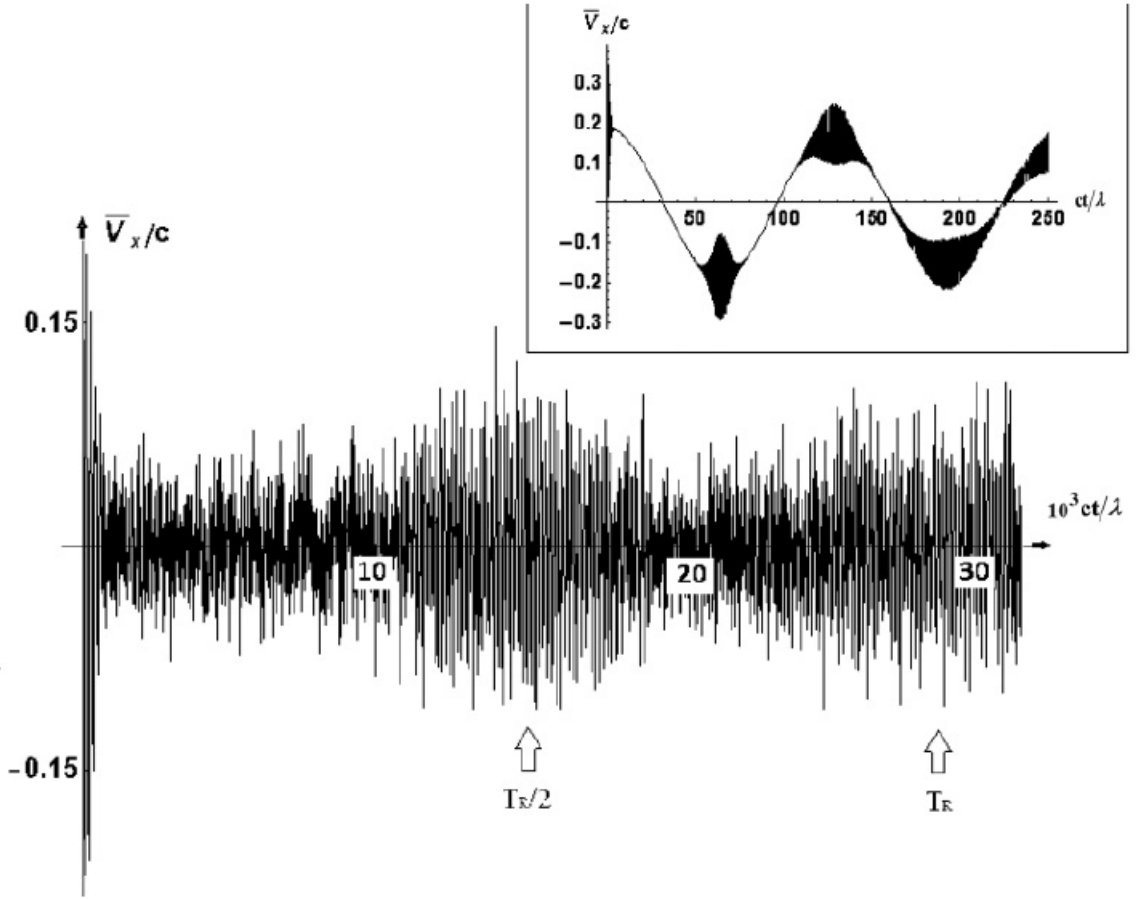


Рисунок 1.6: Зависимость средней скорости $\bar{v}_x(t)$ от времени для начального волнового пакета (1.50) с параметрами $\lambda/a = 0,5$, $qa = 10$. Осцилляции средней скорости $\bar{v}_x(t)$ для времен $t \geq T_{cl}$ показаны на вставке.

согласуется с распределением плотности вероятности, показанной на рис.1.8(a) из-за значительного влияния слагаемых $\sim (n - n_0)^3$ в разложении φ_n для времен $t \leq T_R$. Это утверждение иллюстрирует рис.1.8(b), на котором в момент времени $t = T_R/4$ представлена плотность вероятности, рассчитанная с учетом только первых трех слагаемых в разложении φ_n .

Теперь рассчитаем среднее значение оператора спина. Поскольку начальное состояние волнового пакета (1.50) принадлежит одному из инвариантных подпространств (с $\lambda_k = 1$), средние значения проекций спина $\bar{S}_x = \bar{S}_y = 0$. Используя определение $\bar{S}_z = (\hbar/2)\bar{\sigma}_z$ и выражения (1.54), (1.55) и (1.56), получаем, что

$$\bar{S}_z(\tau) = \frac{\hbar}{2} \sum_{n=1} |c_n|^2 \left(\frac{1 + 2n(\lambda/a)^2 \cos(2\varphi_n\tau)}{\varphi_n^2} \right), \quad (1.60)$$

где коэффициенты c_n определены в (1.24). Соответствующая зависимость представлена на рис.1.9.

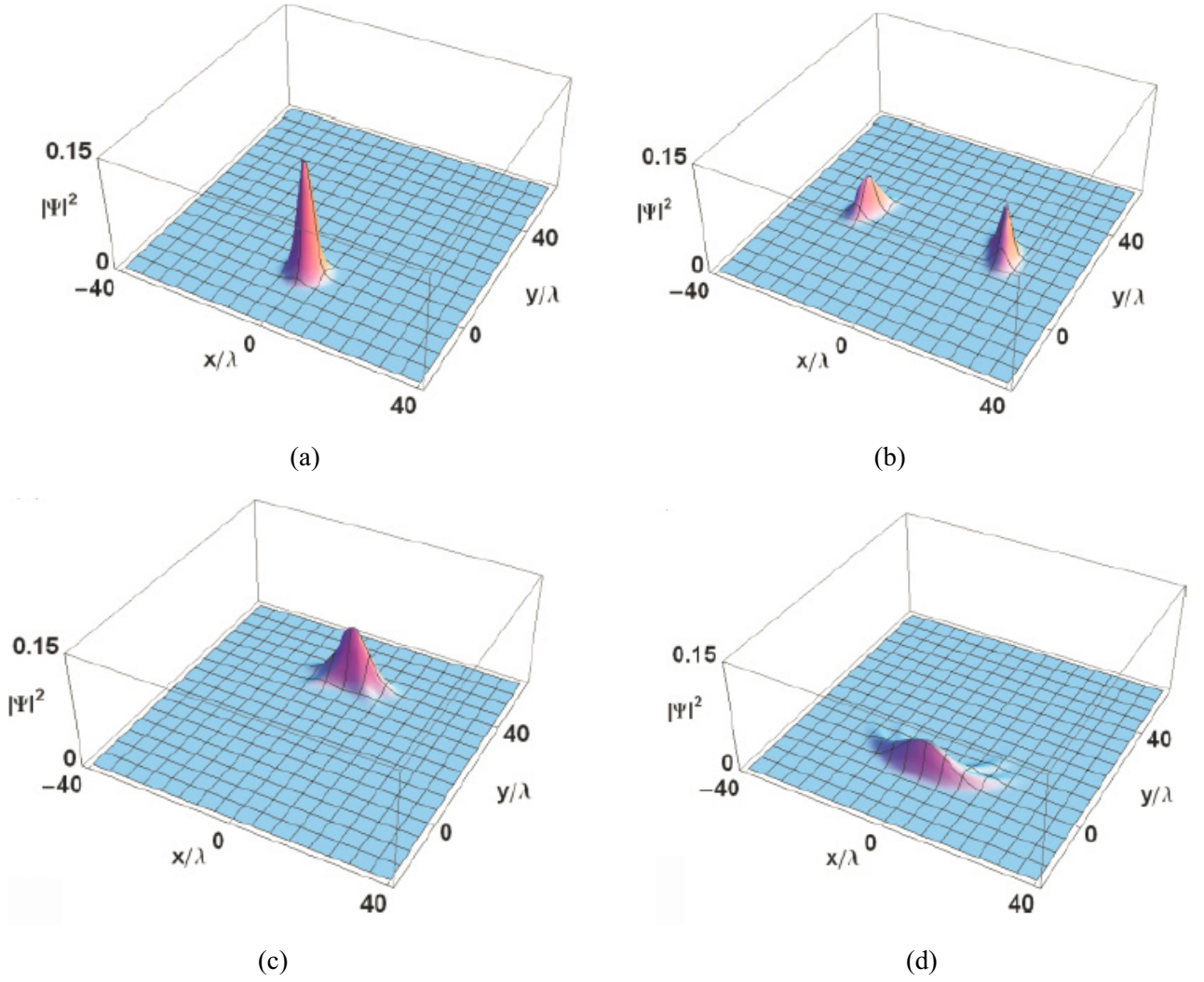


Рисунок 1.7: Распределение плотности вероятности для начального волнового пакета (1.50) с параметрами $\lambda/a = 0,5$, $qa = 10$ в моменты времени: (a) $t = 0$; (b) $t \approx T_{cl}/4$; (c) $t \approx T_{cl}/2$; (d) $t \approx T_{cl}$.

Видно, что среднее значение z -компоненты спина осциллирует с ZB-частотой $\omega_{ZB} \approx 2\varphi_{n_0}c/\lambda$ и сопровождается явлениями коллапса и возрождения. В этом случае, в отличие от предыдущего определения (1.31), соответствующее время возрождения определяется через циклотронный период $T_{rev} = T_{cl}/2$ [6, 12]. В интервалах между ZB-осцилляциями среднее значение $\bar{S}_z(t)$ отлично от нуля. Как уже упоминалось выше, пространственно-временная эволюция исходного волнового пакета (1.50) описывается частью гамильтониана Дирака (1.1), которая идентична модели Джейнса-Каммингса в квантовой оптике [7]. Таким образом, можно утверждать, что формула (1.60) аналогична хорошо известному выражению для заселенности нижнего уровня двухуровневого атома, который подвергается воздействию классического электромагнитного поля [1].

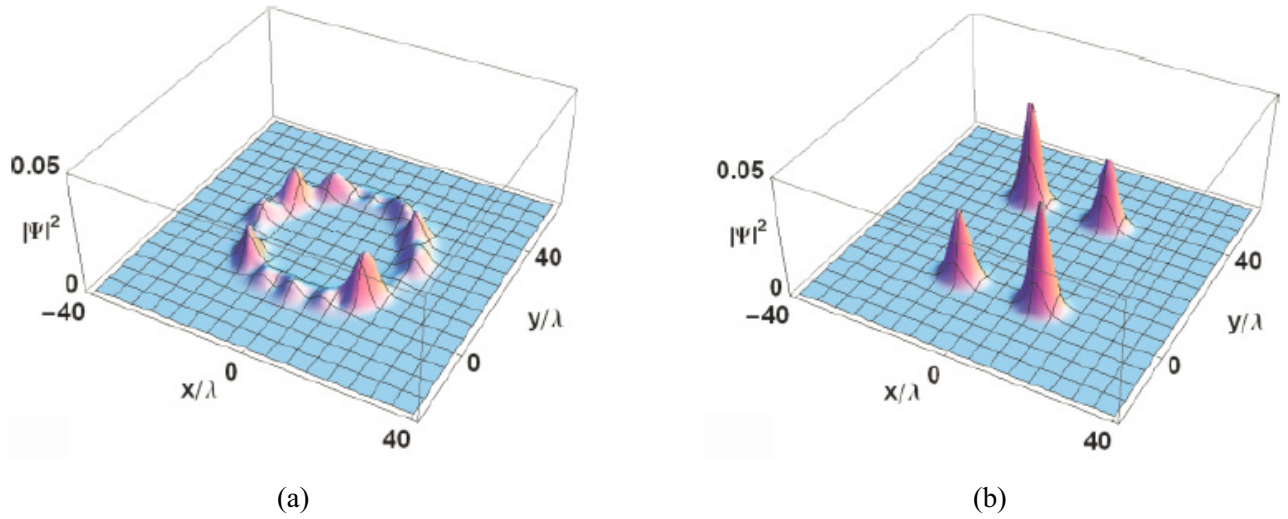


Рисунок 1.8: Распределение плотности вероятности для начального волнового пакета (1.50) с параметрами $\lambda/a = 0,5$, $qa = 10$, $t \approx T_R/4$: (a) для реального энергетического спектра; (b) для спектра, полученного с учетом только первых трех слагаемых в разложении φ_n .

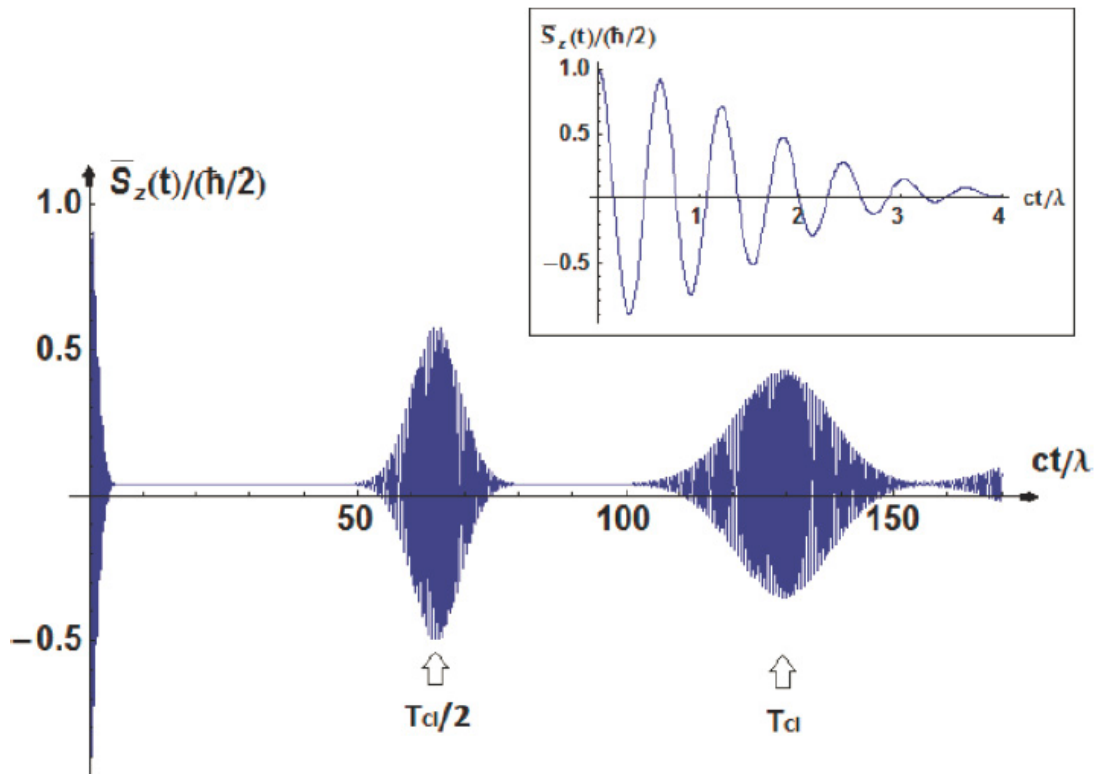


Рисунок 1.9: Зависимость от времени среднего спина \bar{S}_z (в единицах $\hbar/2$) для начального волнового пакета (1.50) с параметрами $\lambda/a = 0,5$, $qa = 10$. Осцилляции среднего спина при малых временах $t \ll T_{cl}$ показаны на вставке.

1.2 Мезоскопические состояния в графене, находящемся в магнитном поле: коллапс и возрождение волновых пакетов

1.2.1 Модель

Как указывалось во Введении, в эволюции волновых пакетов, построенных из состояний, относящихся к неэквидистантному спектру, должен наблюдаться ряд интересных явлений, в том числе коллапс и возрождение волновых пакетов. В настоящем разделе эти явления рассматриваются в монослойном графене, помещенном в однородное магнитное поле. В этом случае электронно-дырочный гамильтониан вблизи точки K зоны Бриллюэна записывается в виде [4]:

$$\hat{H}_K = u \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.61)$$

где $u \approx 10^8$ см/с – скорость Ферми, $\hat{\pi} = \hat{p} + \frac{e}{c}\vec{A}$ – оператор импульса, c – скорость света, $e < 0$ – заряд электрона, \vec{A} – векторный потенциал. В калибровке Ландау (где p_x является интегралом движения) собственные значения и соответствующие собственные функции (1.61) есть

$$\varphi_{p_x, n, s}(x, y) = \frac{\exp(ip_x x / \hbar)}{\sqrt{4\pi\hbar}} (-s |n-1\rangle, |n\rangle)^T, \quad (1.62)$$

$$E_{n, s} = s\hbar\Omega\sqrt{n}, \quad (1.63)$$

где $|n\rangle$ – n -е состояние гармонического осциллятора, $s = \pm 1$ – индекс зоны проводимости и валентной зоны, $\Omega = u\sqrt{2}/a$ – частота перехода с первого уровня Ландау на нулевой, $a = \sqrt{\hbar c / eB}$ – магнитная длина. Для $n = 0$ верхняя компонента в (1.62) зануляется, и нормировочный коэффициент становится равным $1/\sqrt{2\pi\hbar}$.

Неэквидистантность энергетического спектра (1.63) при изучении пространственно-временной эволюции начального локализованного состояния предполагает, как и в других моделях, существование явлений коллапса и возрождения (см., например, [1, 77]). Для иллюстрации этого фундаментального утверждения будем рассматривать динамику волновых пакетов, собранных из

стационарных состояний (1.62) и локализованных в энергетическом пространстве с номерами уровней Ландау вблизи среднего значения n_0 и дисперсией σ [4]:

$$\Psi(x, y, t) = \int dp_x \sum_{n,s} c_{n,s}(p_x) \varphi_{p_x, n, s}(x, y) \exp(-iE_{n,s}t/\hbar), \quad (1.64)$$

$$c_n(p_x) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p_x - q)^2 a^2}{2\hbar^2} - \frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (1.65)$$

1.2.2 Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния одной энергетической зоны

Прежде всего мы рассмотрим эволюцию локализованного волнового пакета (1.64) в нелегированном монослойном графене, составленного из квантовых состояний только верхней энергетической зоны. Для этого выберем коэффициенты разложения (1.65) начального волнового пакета (1.64) по стационарным состояниям (1.62) в виде

$$c_{n,s=-1}(p_x) = 0, c_{n,s=1}(p_x) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p_x - q)^2 a^2}{2\hbar^2} - \frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (1.66)$$

После интегрирования по p_x в (1.64) получаем явный вид для компонент волновой функции с коэффициентами (1.66):

$$\Psi_1(x, y, t) = f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sqrt{2n}}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{y - qa^2 - ix}{a}\right)^{n-1} \times \\ \times \exp\left(-\frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2} - it\sqrt{2n}\right), \quad (1.67)$$

$$\Psi_2(x, y, t) = -f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{y - qa^2 - ix}{a}\right)^n \times \\ \times \exp\left(-\frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2} - it\sqrt{2n}\right), \quad (1.68)$$

где $f(x, y) = \frac{1}{2\pi^{3/4} a \sqrt{\sigma}} \exp\left(-\frac{x^2 + (y - qa^2)^2 - 2ix(y + qa^2)}{4a^2}\right)$.

Заметим, что при переходе к новой системе координат $(x, y - qa^2)$ электронная плотность вероятности $|\Psi(x, y, t)|^2$ не зависит от параметра q . Ясно, что этот параметр определяет только положение центра циклотронной орбиты волнового пакета на оси y . При этом средняя компонента импульса волнового пакета есть $\bar{p}_x = \hbar q$. Аналогично можно убедиться в том, что параметр σ задает дисперсию электронной плотности в начальном состоянии как по x , так и по y .

Теперь рассчитаем среднюю скорость центра волнового пакета (1.67), (1.68). Оператор скорости для монослойного графена вычисляется, как обычно, как коммутатор гамильтониана (1.61) с оператором координаты $\hat{v}_i = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}_i]$. Тривиальные вычисления приводят к явному виду оператора скорости

$$\hat{v}_i = u \hat{\sigma}_i. \quad (1.69)$$

Таким образом, средняя скорость центра волнового пакета есть $\bar{v}_i(t) = u \int \Psi^\dagger \hat{\sigma}_i \Psi dx dy$, и для начального состояния (1.64) с коэффициентами (1.66) имеем (см. также [78]):

$$\begin{aligned} \bar{v}_x(\tau) = -\frac{u}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \times \\ \times \cos\left(\left(\sqrt{2(n+1)} - \sqrt{2n}\right)\tau\right), \end{aligned} \quad (1.70)$$

$$\begin{aligned} \bar{v}_y(\tau) = -\frac{u}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \times \\ \times \sin\left(\left(\sqrt{2(n+1)} - \sqrt{2n}\right)\tau\right), \end{aligned} \quad (1.71)$$

где $\tau = t \frac{u}{a}$.

Особенности временной динамики волновых пакетов, связанные с неэквидистантностью энергетического спектра (1.63), наглядно иллюстрируются на графике $\bar{v}_x(\tau)$ (рис.1.10). При малых временах начальный волновой пакет (рис.1.11(a)) совершает циклотронное движение с периодом $T_{cl} = 2\pi\hbar/E'_{n_0} = 4\pi\sqrt{n_0}/\Omega$. Для параметров $n_0 = 20$, $B = 10$ Т, $\sigma = 2$ он оказывается равным $T_{cl} \approx 0,3$ пс. Однако, спустя несколько оборотов, происходит расфазировка вкладов отдельных стационарных состояний в суперпози-

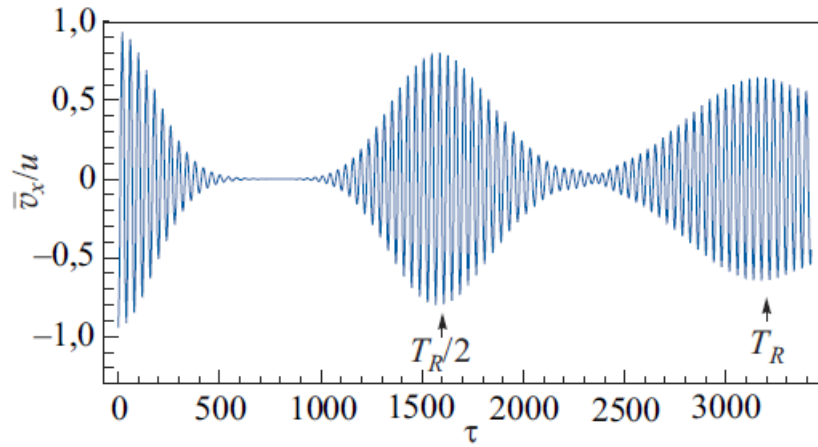


Рисунок 1.10: Зависимость средней скорости $\bar{v}_x(t)$ центра волнового пакета (1.64), (1.66) от времени, $n_0 = 20$, $B = 10$ Тл, $\sigma = 2$.

цию (1.67), (1.68), обусловленная слабой неэквидистантностью уровней Ландау $E_n \approx E_{n_0} + E'_{n_0}(n - n_0) + \frac{E''_{n_0}}{2}(n - n_0)^2 + \dots$ с номерами $n_0 - \sigma < n < n_0 + \sigma$, вследствие чего происходит «развал» начального волнового пакета – он расплывается по циклотронной орбите (рис.1.11(b)). Однако, на временном интервале $T_{cl} \ll t < T_R$ (здесь $T_R = 4\pi\hbar/|E''_{n_0}| = 16\pi n_0^{3/2}/\Omega \approx 2,5$ пс – время возрождения) в отдельные моменты $t = mT_R/n$ (где m и n – взаимно простые числа) фазы отдельных слагаемых в (1.67), (1.68) становятся кратны 2π , что позволяет начальному волновому пакету частично собраться в $N = n(3 - (-1)^n)/4$ подпакетов [1]. При этом так называемом дробном возрождении пики мультипольного излучения от вращающихся пакетов должны следовать вдвое, втрое, вчетверо и т.д. чаще, чем на начальном этапе. Электромагнитное излучение, исходящее от таких подпакетов, будет иметь сложный фурье-спектр. Поляризация излучения будет также изменяться во времени. В частности, при $t = T_R/4$ мы должны наблюдать два подпакета, расположенных на циклотронной орбите в диаметрально противоположных точках (см. рис.1.11(c)). При этом излучение будет иметь квадрупольный, а не дипольный характер. В моменты времени, кратные $T_R/2$, наблюдается возрождение осцилляций средней скорости, что соответствует восстановлению начального волнового пакета (рис.1.11(d)). Отметим также, что для волнового пакета (1.64), (1.66) высокочастотные осцилляции, связанные с ЗВ, невозможны, потому что волновой пакет содержит состояния с энергией одного знака.

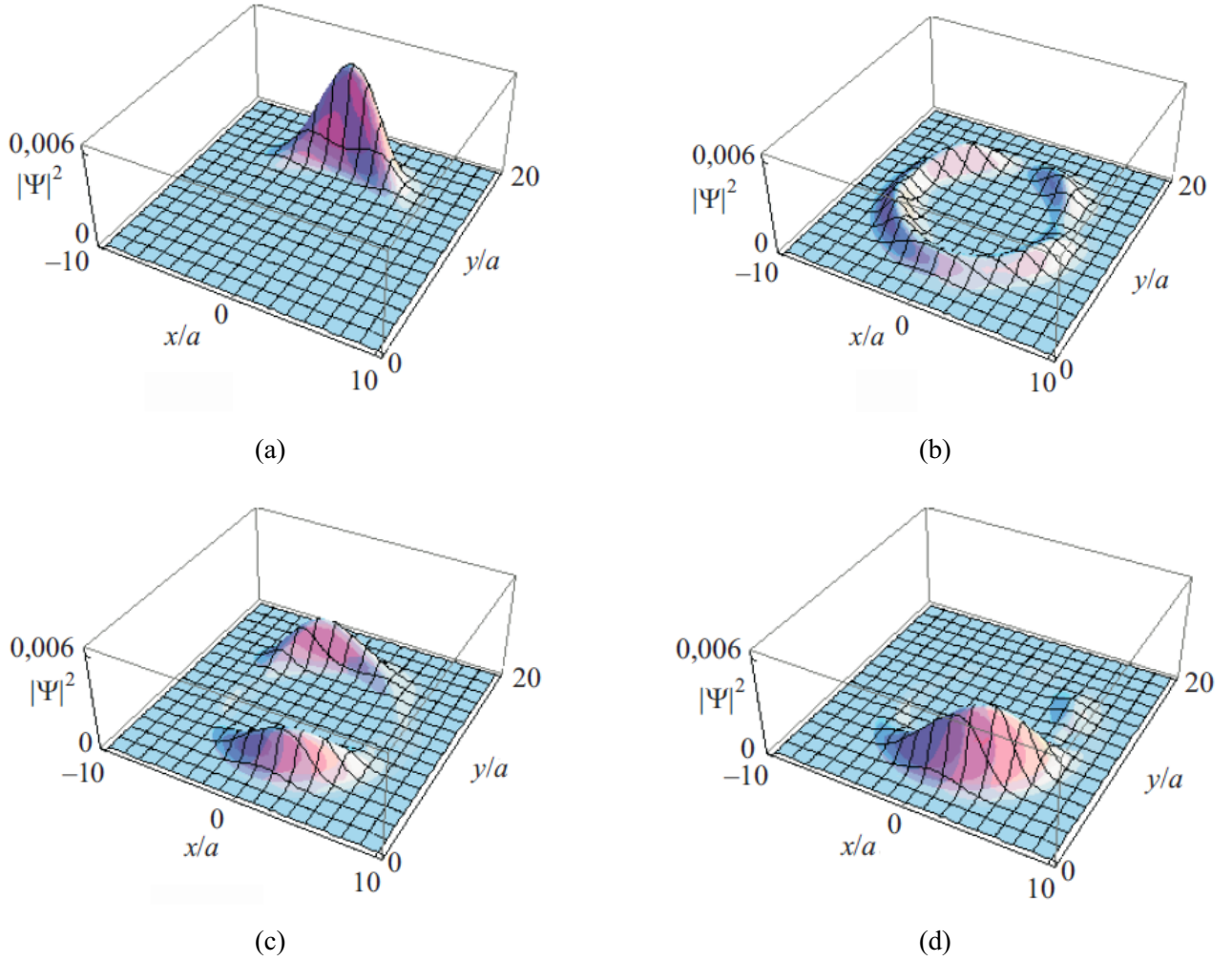


Рисунок 1.11: Плотность вероятности $|\Psi(x, y)|^2$ для волнового пакета (1.64), (1.66) с параметрами $n_0 = 20$, $\sigma = 2$, $a \approx 10^{-6}$ см, $q \approx 10^7$ см $^{-1}$ в моменты времени: (a) $t = 0$; (b) $t \approx 0,1 \cdot T_R$; (c) $t \approx T_R/4$; (d) $t \approx T_R/2$.

Из выражений (1.70), (1.71) нетрудно получить среднюю координату центра волнового пакета $\bar{\mathbf{r}}(t)$, представленную на рис.1.12. Видно, что с течением времени средняя координата центра пакета стремится в центр его циклотронной орбиты. Подобная динамика центра волнового пакета впервые обсуждалась Русиным и Завадским [79]. Здесь следует, однако, отметить, что $\bar{\mathbf{r}}(t)$ в данной ситуации не является удобной характеристикой. Действительно, с течением времени электронная плотность вероятности (1.66) всегда распределена по циклотронной орбите. При этом в те моменты времени, когда это распределение оказывается примерно равномерным, средний радиус центра пакета стремится к центру циклотронной орбиты.

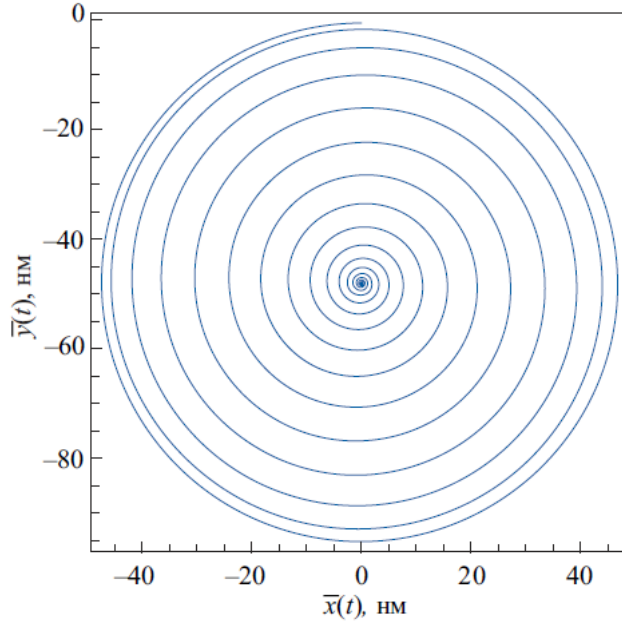


Рисунок 1.12: Средний радиус центра волнового пакета (1.64), (1.66), построенного из состояний верхней зоны вблизи точки K , при $0 \leq t \leq 0,8$ пс. Здесь $n_0 = 20$, $\sigma = 2$, $a \approx 10^{-6}$ см., $q \approx 10^7$ см $^{-1}$.

1.2.3 Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния с положительными и отрицательными энергиями

В данном разделе мы рассмотрим эволюцию волнового пакета, содержащего состояния как верхней, так и нижней энергетических зон, в легированном монослойном графене. Для того чтобы создать такой пакет, необходимо, чтобы химический потенциал оказался в области отрицательных энергий. Аналогично ситуации, рассмотренной в разделе 1.2.2, выберем коэффициенты разложения в (1.64) в виде

$$c_{n,s=-1}(p_x) = c_{n,s=1}(p_x) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p_x - q)^2 a^2}{2\hbar^2} - \frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (1.72)$$

В этом случае явный вид компонент волновой функции пакета в произвольный момент времени есть

$$\Psi_1(x, y, t) = f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sqrt{2n}}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right) \left(\frac{y - qa^2 - ix}{a}\right)^{n-1} \times \\ \times \cos\left(\sqrt{2n}\tau\right), \quad (1.73)$$

$$\Psi_2(x, y, t) = f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right) \left(\frac{y - qa^2 - ix}{a}\right)^n \times \sin\left(\sqrt{2n}\tau\right). \quad (1.74)$$

Вычисления для компонент средней скорости, выполненные для начального состояния (1.64) с коэффициентами (1.72), дают следующие результаты:

$$\bar{v}_x(\tau) = 0,$$

$$\bar{v}_y(\tau) = \frac{2u}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(n - n_0)^2 + (n - n_0 + 1)^2}{2\sigma^2}\right) \times \left(\sin\left(\left(\sqrt{2(n+1)} + \sqrt{2n}\right)\tau\right) - \sin\left(\left(\sqrt{2(n+1)} - \sqrt{2n}\right)\tau\right)\right). \quad (1.75)$$

Таким образом, волновой пакет (рис. 1.13(a)), состоящий наполовину из состояний верхней зоны и наполовину – из состояний нижней энергетической зоны, на начальной стадии своей эволюции расщепляется на два подпакета, вращающиеся в противоположных направлениях по циклотронной орбите (рис. 1.13(b)). В результате в каждый момент времени x -компонента средней скорости равна нулю, а y -компонента, в отличие от предыдущего случая, осциллирует с двумя несоизмеримыми частотами (рис. 1.14). Второе слагаемое в (1.75), как и в случае пакета, составленного из состояний только верхней зоны, описывает осцилляции, связанные с периодическим движением каждого подпакета по циклотронной орбите по сценарию, описанному в предыдущем разделе. Первое слагаемое в (1.75) осциллирует с существенно большей частотой и обусловлено чисто квантовым явлением – ZB, представляющим собой в нашем случае интерференцию двух подпакетов, наблюдаемую два раза за циклотронный период. Частота таких осцилляций равна $\omega_{ZB} = 2E_{n_0}/\hbar$. На вставке к рис. 1.14 показаны ZB-осцилляции центра волнового пакета на первых двух классических периодах. Однако через достаточно большой промежуток времени, когда каждый подпакет распределяется примерно равномерно по циклотронной орбите, эффект интерференции наблюдается практически перманентно за исключением моментов дробного возрождения. Это явление приводит к нарушению четкой картины коллапса и возрождения (рис. 1.14), описанной в разделе 1.2.2. В частности, на

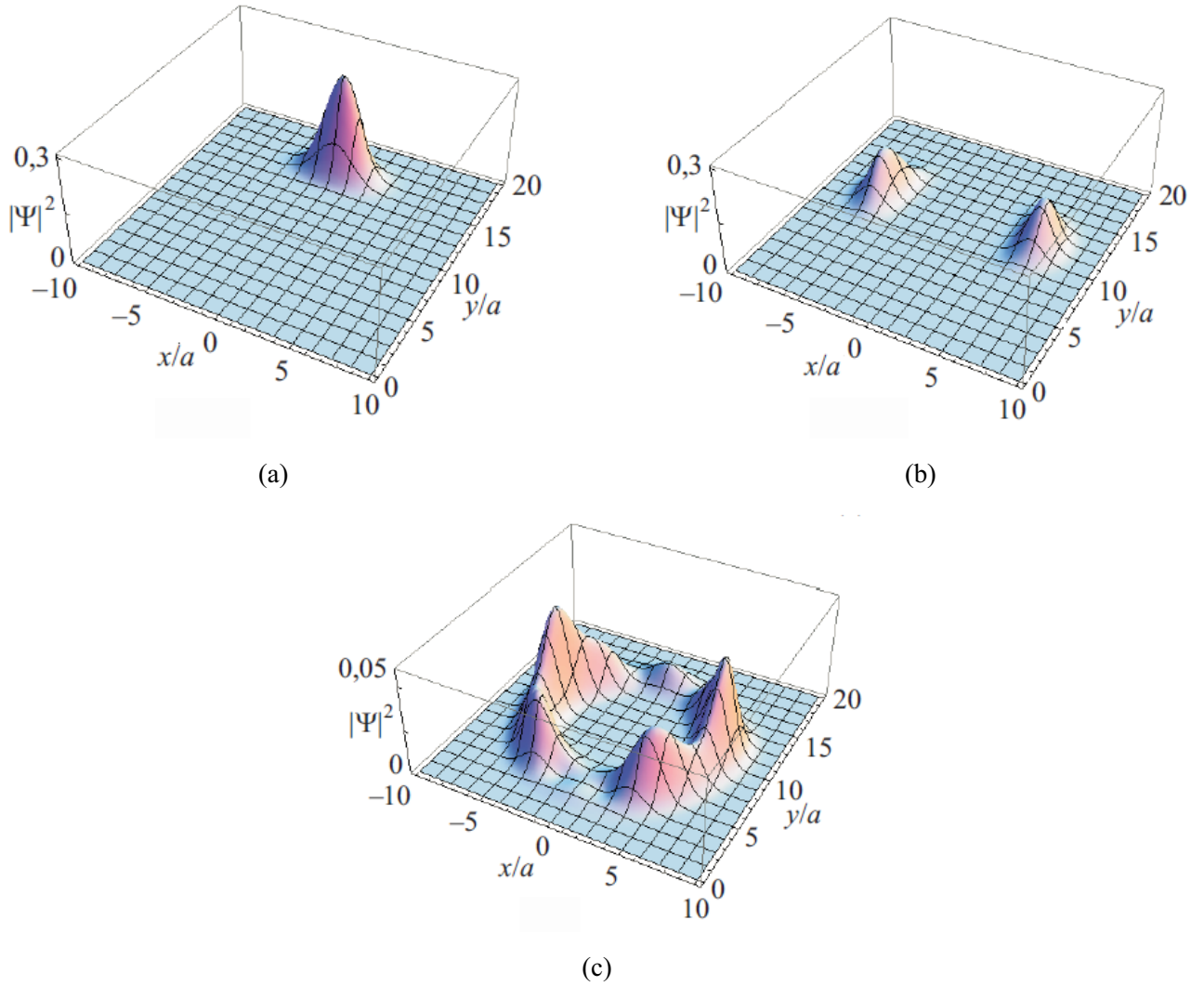


Рисунок 1.13: Плотность вероятности $|\Psi(x, y)|^2$ для волнового пакета (1.64), (1.72) с параметрами $n_0 = 20$, $\sigma = 2$, $a \approx 10^{-6}$ см, $q \approx 10^7$ см $^{-1}$ в моменты времени: (a) $t = 0$; (b) $t \approx 0,2 \cdot T_{cl}$; (c) $t \approx T_R/4$.

рис.1.13(c) приведена плотность вероятности пакета в момент времени $t \approx T_R/4$, представляющая собой регулярную структуру из четырех подпакетов.

Ранее эффекты ZB в графене подробно изучались в работах [20, 79, 81]. Подобные эффекты в динамике волновых пакетов были обнаружены в двумерном электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы [18], а также при изучении динамики релятивистских дираковских пакетов в магнитном поле [82].

Как известно, в монослойном графене энергетический спектр имеет дираковский характер в неэквивалентных точках (долинах) K и K' , лежащих на границе зоны Бриллюэна. Здесь мы обсудим особенности эволюции волновых па-

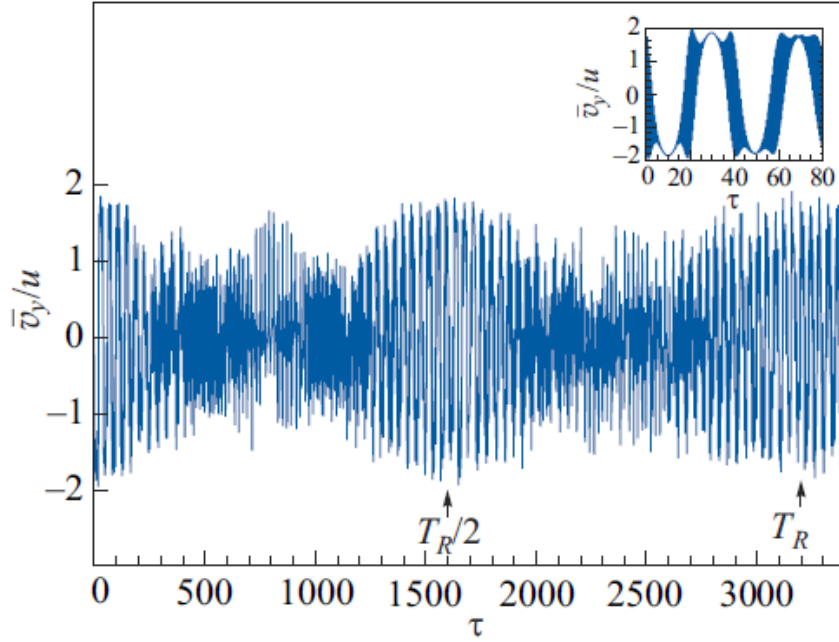


Рисунок 1.14: Зависимость средней скорости $\bar{v}_y(t)$ центра волнового пакета (1.64), (1.72) от времени, $n_0 = 20$, $B = 10$ Тл, $\sigma = 2$.

кетов, составленных из состояний, лежащих вблизи точки K' в монослойном графене во внешнем перпендикулярном магнитном поле, где гамильтониан имеет вид [83, 84]

$$\hat{H}_{K'} = u \begin{pmatrix} 0 & -\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ -\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.76)$$

Отметим, что $\hat{H}_{K'} = -\hat{H}_{K'}^T$. Спектр гамильтониана и соответствующие собственные функции есть (в калибровке Ландау)

$$E_{n,s} = s\hbar\Omega\sqrt{n}, \quad (1.77)$$

$$\varsigma_{p_x, n, s}(x, y) = \frac{\exp(ip_x x/\hbar)}{\sqrt{4\pi\hbar}} (|n\rangle, s |n-1\rangle)^T. \quad (1.78)$$

Таким образом, если мы возбуждаем электронные состояния в графене с номерами уровней Ландау вблизи среднего значения n_0 и дисперсией σ в окрестности точки K' , коэффициенты разложения начального волнового пакета по базису (1.78) должны быть такими же, как (1.66). Соответственно, сформированный из этих коэффициентов волновой пакет будет отличаться от аналогичного пакета,

рассмотренного в разделе 1.2.2:

$$\Phi(x, y, t) = \int dp_x \sum_{n,s} c_{n,s}(p_x) \varsigma_{p_x, n, s}(x, y) \exp(-iE_{n,s}t/\hbar). \quad (1.79)$$

Однако из-за того, что собственные функции (1.62) переходят в соответствующие функции (1.78) при перестановке нижней и верхней компонент и последующей сменой знака у нижней компоненты, а оператор скорости для гамильтониана $\hat{H}_{K'}$ есть $\hat{v}'_x = -\hat{v}_x$, $\hat{v}'_y = \hat{v}_y$, поведение рассматриваемого пакета оказывается эквивалентным поведению пакета (1.67), (1.68) [26].

1.3 *Zitterbewegung* волновых пакетов и кондактанс квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия

1.3.1 Электронные квантовые состояния в квазиодномерном канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы

Эволюция волновых пакетов в условиях конфайнмента, т.е. в квантовых каналах со спин-орбитальным взаимодействием, имеет ряд особенностей. В настоящем разделе рассматриваются квантовые состояния в таких системах, их кондактанс, а также эволюция волновых пакетов.

Следуя работам [A3], [A4], рассмотрим квазиодномерный канал, в котором движение электронов вдоль оси y свободное, а по оси x ограничено потенциалом $V(x)$ – бесконечно глубокой потенциальной ямой ширины a . Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(x), \quad (1.80)$$

где m – эффективная масса электрона, $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < a, \\ \infty & \text{при } x \leq 0, x \geq a. \end{cases}$

Спин-орбитальное взаимодействие в канале будем описывать известным гамильтонианом Рашбы [29]

$$\hat{H}_R = \frac{\alpha}{\hbar} (\hat{p}_y \sigma_x - \hat{p}_x \sigma_y), \quad (1.81)$$

где α – константа спин-орбитального взаимодействия Рашбы, $\hat{p}_k = -i\hbar\partial/\partial x_k$ – оператор импульса, σ_x, σ_y – матрицы Паули.

Волновая функция в канале ищется в виде разложения по собственным функциям оператора \hat{H}_0 , явный вид которых $\Psi_{n,k_y}^{(0)}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_y y} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right)$:

$$\Psi_{k_y}(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \begin{pmatrix} c_n \\ d_n \end{pmatrix} \Psi_{n,k_y}^{(0)}(x, y). \quad (1.82)$$

Подставляя искомую функцию в уравнение Шрёдингера с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_R$, получаем бесконечную систему алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов c_n и d_n :

$$\begin{cases} \left(\frac{\hbar^2(k_y^2 + k_n^2)}{2m} - E \right) c_n + \alpha k_y d_n + \alpha \sum_{l=1}^{\infty} \Delta_{n,l} d_l = 0, \\ \alpha k_y c_n - \alpha \sum_{l=1}^{\infty} \Delta_{n,l} c_l + \left(\frac{\hbar^2(k_y^2 + k_n^2)}{2m} - E \right) d_n = 0. \end{cases} \quad (1.83)$$

Здесь $\Delta_{n,l} = 0$, если n, l – одинаковой чётности и $\Delta_{n,l} = \frac{4nl}{a(n^2 - l^2)}$, если n, l – различной чётности, $k_n = \frac{\pi n}{a}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Результат численного расчёта спектра 2D-электронов в квазиодномерном канале с взаимодействием Рашбы (в (1.82) учитывались 20 нижних уровней) приведены на рис.1.15. Как видно из рисунка, в точках с $k_y \neq 0$ вырождение по спину снялось.

1.3.2 Динамика волновых пакетов в квазиодномерном канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. *Zitterbewegung*

Zitterbewegung, или осцилляторная динамика релятивистских электронов, предсказана Шрёдингером в 1933 году. Согласно этому предсказанию центр электронного волнового пакета в отсутствии внешних полей осциллирует с характерной частотой $\omega = 2mc^2/\hbar$, причем амплитуда осцилляций имеет порядок комптоновской длины волны электрона $\hbar/2mc$. До настоящего времени этот фундаментальный физический эффект не наблюдался экспериментально. Аналогичное поведение волновых пакетов было предсказано для электронов в узкозон-

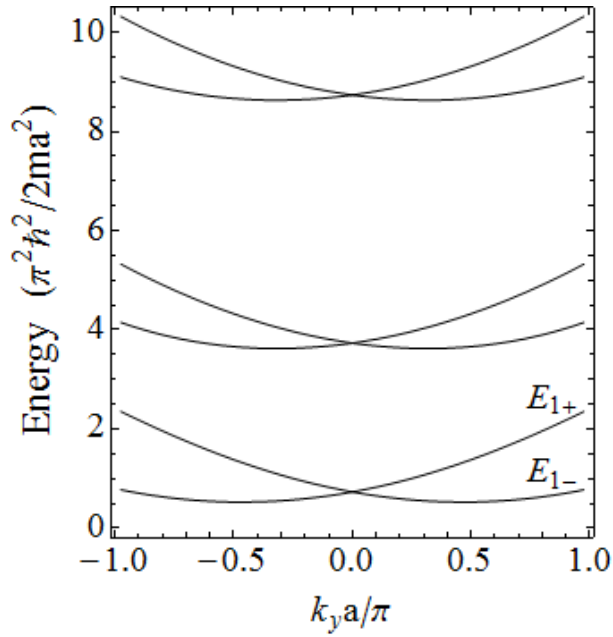


Рисунок 1.15: Электронный энергетический спектр канала со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы ($GaAs/In_{0,23}Ga_{0,77}As$): $\alpha = 2,5 \cdot 10^{-11}$ эВ·м, $m = 0,05 \cdot m_0$, $a = 100$ нм, m_0 – масса свободного электрона.

ных полупроводниках ($\omega_{ZB} = \varepsilon_g / \hbar$ – частота осцилляций), в 2D-электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием [85], углеродных нанотрубках, в графене [20], а также в сверхпроводниках. Во всех подобных системах электронные возбуждения принадлежат двум энергетическим зонам.

Для расчета волновой функции электронного волнового пакета в канале со спин-орбитальным взаимодействием в произвольный момент времени воспользуемся известным методом функции Грина. «Хорошими» квантовыми числами, определяющими волновые функции стационарных состояний, являются номер нерасщеплённой спин-орбитой «ямного» уровня в канале n , проекция волнового вектора на направление вдоль канала k_y , а также индекс ветви $s = \langle + \rangle$ или $\langle - \rangle$ расщеплённого спин-орбитальным взаимодействием n -ого энергетического уровня. Проведённый расчёт электронного спектра, представленный на рис. 1.15, показывает, что он хорошо аппроксимируется функцией вида $E_{n,s}(k_y) \approx E_n^{(k_y=0)} + \hbar^2 k_y^2 / 2m^* + s\alpha^* k_y$, где m^* и α^* практически совпадают с m и α исходного гамильтониана (1.80), (1.81), $s = \pm 1$. $E_n^{(k_y=0)}$ – энергетический спектр в канале со спин-орбитальным взаимодействием при $k_y = 0$. Таким

образом, матричные элементы функции Грина записываются в виде:

$$G_{ij}(x, x', y, y', t) = \sum_{n,s} \int \Psi_{k_y, n, s, i}(x, y, t) \Psi_{k_y, n, s, j}^*(x', y', 0) dk_y, \quad (1.84)$$

а двухкомпонентные функции стационарных состояний $\Psi_{k_y, n, s}(x, y)$ рассчитаны численно ранее.

Чтобы понять влияние спин-орбитального взаимодействия на эволюцию волновых пакетов, сформируем в квазиодномерном канале волновой пакет гауссовой формы с начальной поляризацией спина вдоль оси z :

$$\Psi(x, y, t = 0) = \sqrt{\frac{2}{da\sqrt{\pi}}} e^{-y^2/2d^2 + ik_{0y}y} \sin(\pi x/a) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv f(x, y) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.85)$$

эволюция которого в отсутствие спин-орбитального взаимодействия хорошо известна.

Тогда, чтобы рассчитать волновую функцию пакета в произвольный момент времени, нам потребуются две компоненты электронной функции Грина, а именно:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x, y, t) \\ \Psi_2(x, y, t) \end{pmatrix} = \iint dx' dy' \begin{pmatrix} G_{11}f(x', y') \\ G_{21}f(x', y') \end{pmatrix}.$$

В случае, когда учитываются только два низших уровня в (1.84), удаётся получить точные аналитические выражения для функции плотности вероятности:

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t) &= \frac{a}{2d\sqrt{\pi(1+(t/t_0)^2)}} \times \\ &\times \left(c_{1-}^2 (\Psi_{1-}^2(x) + \Psi_{2-}^2(x)) \exp\left(-\frac{(k_{0y}\hbar t/m - y - \alpha t/\hbar)^2}{d^2(1+(t/t_0)^2)}\right) + \right. \\ &+ c_{1+}^2 (\Psi_{1+}^2(x) + \Psi_{2+}^2(x)) \exp\left(-\frac{(k_{0y}\hbar t/m - y + \alpha t/\hbar)^2}{d^2(1+(t/t_0)^2)}\right) + \\ &+ 2c_{1+}c_{1-} (\Psi_{1+}(x)\Psi_{1-}(x) + \Psi_{2+}(x)\Psi_{2-}(x)) \times \\ &\times \cos\left(\frac{2m\alpha(k_{0y}\hbar t/m + y(t/t_0)^2)}{\hbar^2(1+(t/t_0)^2)}\right) \exp\left(-\frac{((k_{0y}\hbar t/m - y)^2 + (\alpha t/\hbar)^2)^2}{d^2(1+(t/t_0)^2)}\right) \Bigg), \end{aligned} \quad (1.86)$$

где $t_0 = md^2/\hbar$, функции $\Psi_{1\pm}(x)$, $\Psi_{2\pm}(x)$ рассчитываются численно.

Первые два слагаемых в (1.86) описывают два пакета гауссовой формы, образовавшихся из начального пакета и распространяющихся со скоростями $k_{0y}\hbar/m \pm \alpha/\hbar$. Очевидно, что центры этих пакетов разбегаются друг относительно друга со скоростью $2\alpha/\hbar$, пропорциональной константе спин-орбитального взаимодействия. Последнее слагаемое в (1.86) отвечает за осцилляции центра волнового пакета. Формы волновых пакетов, а также спиновые поляризации для различных моментов времени в различных масштабах по y и ρ представлены на рис.1.16, 1.17. Расчёты произведены для структуры с параметрами $\alpha/\hbar = 3,6 \cdot 10^6$ см/с, $m = 0,05 \cdot m_0$, $a = 2 \cdot 10^{-6}$ см, $d = 10^{-5}$ см, $k_{0y} = 2,5 \cdot 10^5$ см $^{-1}$.

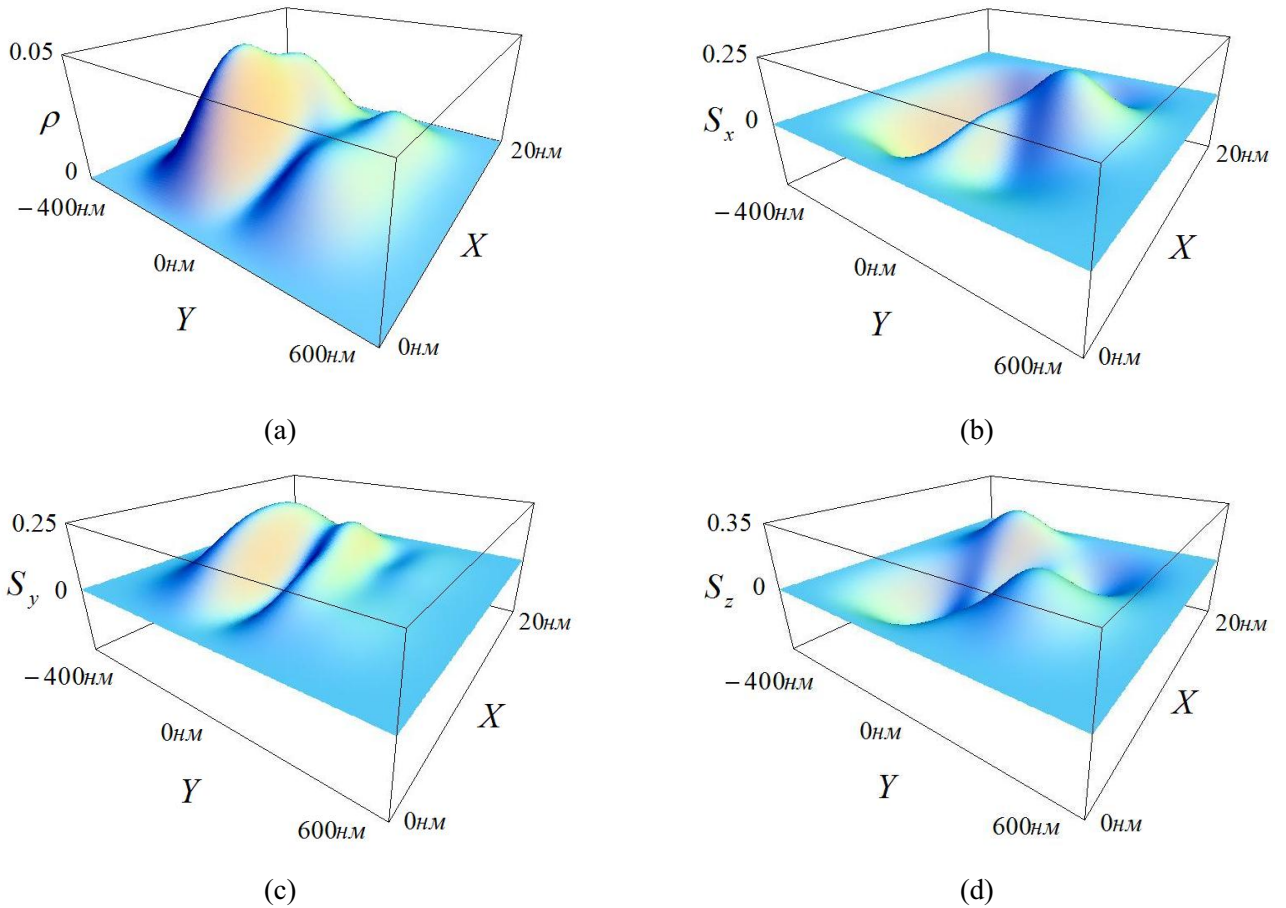


Рисунок 1.16: Волновой пакет в квазиодномерном канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы в момент времени $t = 1$ (в единицах md^2/\hbar): (a) электронная плотность; (b) спиновая плотность \bar{S}_x ; (c) спиновая плотность \bar{S}_y ; (d) спиновая плотность \bar{S}_z . Параметры системы указаны в тексте.

С течением времени происходит расщепление гауссовского волнового пакета на две части, распространяющихся с различной скоростью, а также расплыва-

ние, связанное с дисперсией. На рис.1.17(a) показаны два пакета в момент времени $t = 3$ (в единицах $d\hbar/\alpha \approx 2,8 \cdot 10^{-12}$ с). Нетрудно убедиться, что та часть расщепившегося пакета, которая движется с большей скоростью, сформирована преимущественно из состояний зоны E_{1+} , а часть пакета, распространяющаяся с меньшей скоростью – из состояний зоны E_{1-} (см. рис.1.15). Из представленных на рис.1.16(d), 1.17(d) графиков спиновой плотности \bar{S}_z видно, что с течением времени среднее значение проекции спина на эту ось стремится к нулю. В отличие от результатов работы [18], где рассматривается 2D-газ без конфайнмента, спиновая поляризация в канале имеет иную структуру: максимумы области со спином «верх» и «вниз» находятся в вершинах квадрата, располагаясь на разных его диагоналях. С течением времени, как видно из приведённых графиков, эта закономерность сохраняется.

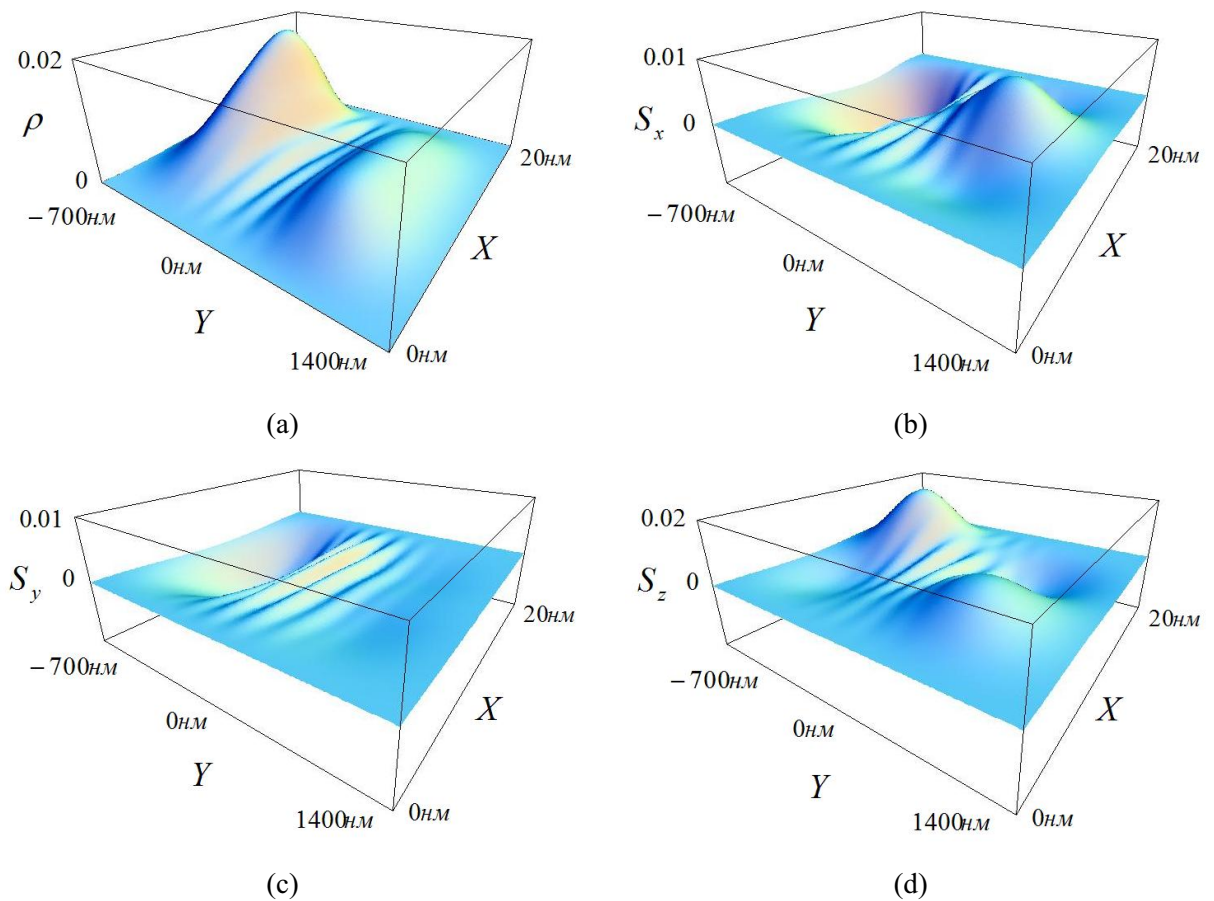


Рисунок 1.17: Волновой пакет в квазиодномерном канале со спин-орбитальным взаимодействием в момент времени $t = 3$ (в единицах md^2/\hbar): (a) электронная плотность; (b) спиновая плотность \bar{S}_x ; (c) спиновая плотность \bar{S}_y ; (d) спиновая плотность \bar{S}_z . Параметры системы те же, что на рис.1.16.

Для теоретического исследования *Zitterbewegung* необходимо рассчитать среднее значение координаты центра волнового пакета как функцию времени по стандартной формуле, которая, в случае приближения двух уровней в (1.84), дает простой результат:

$$\begin{aligned} \bar{x}(t) &= \iint \Psi^\dagger(x, y, t)x\Psi(x, y, t)dx dy = \\ &= \frac{a}{2} \left(c_{1-}^2 \int_0^a (\Psi_{1-}^2(x) + \Psi_{2-}^2(x)) x dx + c_{1+}^2 \int_0^a (\Psi_{1+}^2(x) + \Psi_{2+}^2(x)) x dx + \right. \\ &\quad \left. + 2c_{1+}c_{1-}e^{-(\alpha t/\hbar d)^2} \cos(2\alpha k_{0y}t/\hbar) \int_0^a (\Psi_{1+}(x)\Psi_{1-}(x) + \Psi_{2+}(x)\Psi_{2-}(x))x dx \right). \end{aligned} \quad (1.87)$$

Поскольку последнее слагаемое в (1.87) пропорционально $e^{-(\alpha t/\hbar d)^2} \cos(2\alpha k_{0y}t/\hbar)$, центр волнового пакета, то есть $\bar{x}(t)$, испытывает затухающие колебания. Из рис.1.16(a) и 1.17(a) видно, что волновые пакеты в различные моменты времени не симметричны по отношению к замене $x \rightarrow -x$. Это, в конечном итоге, и приводит к осцилляциям центра пакета в направлении x (ZB), что наглядно иллюстрирует рис.1.18. При этом частота осцилляций пропорциональна произведению константы взаимодействия Рашбы на проекцию начального волнового вектора пакета k_{0y} и равна $\omega_{ZB} = 2\alpha k_{0y}/\hbar$. Видно, что на временах порядка $\tau = \hbar d/\alpha$ осцилляции затухают, что соот-

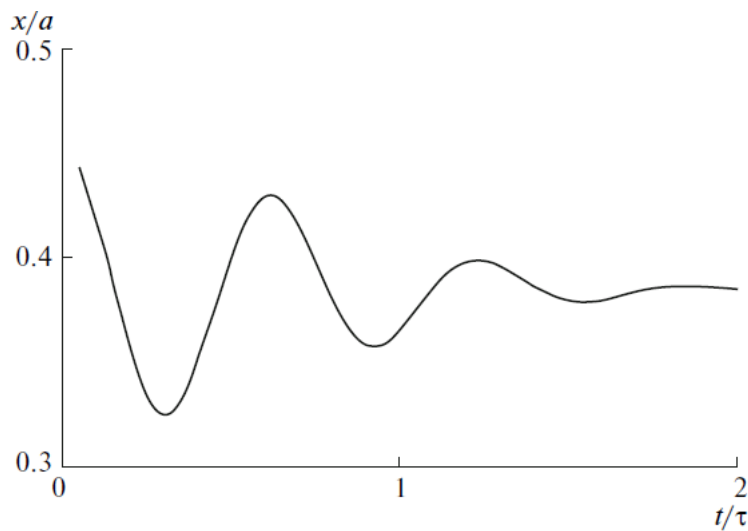


Рисунок 1.18: Среднее значение координаты центра волнового пакета $\bar{x}(t)$ от времени в квазиодномерном канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Расчёт выполнен для тех же параметров структуры, что на рис.1.16.

ветствует окончательному «разбеганию» пакетов друг относительно друга. При этом квантовые состояния, относящиеся к ветвям E_{1+} и E_{1-} , уже не интерферируют. Следует отметить, что при больших временах $\tau \gg 1$ центр волнового пакета смещается относительно центра канала к его границе на постоянную величину, которая в нашем случае примерно равна $0,1 \cdot a$. Для пакетов, распространяющихся в обратном направлении, эта величина имеет противоположный знак.

1.3.3 Кондактанс квазиодномерного канала со спин-орбитальным взаимодействием

Для того, чтобы можно было управлять проводимостью квазиодномерного канала, введём в систему симметричный δ -образный потенциал: $V(-a < x < a) = U_0 \cdot \delta(x)$ (рис.1.19). В реальной ситуации барьер, разделяющий канал, имеет конечную ширину $2b$ ($b \ll a$) и амплитуду потенциала V_0 , так что эффективно высота барьера равна $V_0 = U_0/2b$. Подобная задача приближённо рассматривалась нами в работе [А3], где при расчёте квантовых состояний учитывались только два или четыре нижних уровня. Далее в разложении волновых функций в канале со спин-орбитальным взаимодействием будет учитываться большее число состояний невозмущённой задачи, обеспечивающее достаточно высокую точность.

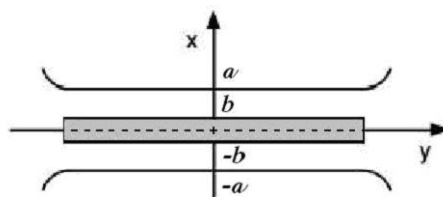


Рисунок 1.19: 2D-газ в канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. δ -функцией моделируется туннельно-прозрачный потенциал конечной ширины $2b$ и высоты V_0 .

В отсутствии спин-орбитального взаимодействия при достаточно большом значении U_0 и, соответственно, малом параметре $\varepsilon = \pi \hbar^2 / maU_0 \ll 1$ спектр, как известно, состоит из близких пар уровней. В каждой такой паре одному из уров-

ней отвечает симметричная волновая функция, а другому — антисимметричная:

$$\Psi_{2n-1}(x) = A \sin(k_{2n-1}(|x| - a)), \quad \Psi_{2n}(x) = B \sin(k_{2n}x), \quad (1.88)$$

где $2a$ — ширина канала вдоль оси x , $k_{2n-1}a \approx \pi n - \varepsilon n$, $k_{2n}a = \pi n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$ — номер пары уровней). Каждый уровень такой системы является двукратно вырожденным по спину.

В присутствии спин-орбитального взаимодействия Рашбы электронный спектр и волновые функции можно вычислить, выбрав в качестве базиса функции (1.88). В двухуровневом приближении удаётся аналитически получить выражение для энергетического спектра:

$$E_{1,2,3,4}(k_y) = E_0 \left(1 + \tilde{k}_y^2 - \frac{\varepsilon}{\pi} \left(1 \pm \sqrt{\left(1 \pm \frac{2\tilde{\alpha}\tilde{k}_y}{\varepsilon} \right)^2 + \tilde{\alpha}^2} \right) \right), \quad (1.89)$$

где $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$; $\tilde{\alpha} = \alpha ma / \hbar^2$, $\tilde{k}_y = k_y a / \pi$ — безразмерные константа спин-орбитального взаимодействия Рашбы и проекция волнового вектора на ось y . Выражение (1.89) определяет четыре ветви спектра, что соответствует всевозможным комбинациям знаков «+» и «-».

Из полученного выражения видно, что при $k_y = 0$ спектр, как и в случае отсутствия спин-орбитального взаимодействия, в соответствии с теоремой Крамера остаётся двукратно вырожденным (по спину). При конечных $k_y \neq 0$ каждый уровень расщепляется на два, и вырождение по спину снимается. В частности, при малых значениях $k_y a \ll 1$ это расщепление оказывается линейным по k_y : $E(k_y) \approx E_0 \left(1 - \frac{\varepsilon}{\pi} (1 \pm \sqrt{1 + \tilde{\alpha}^2}) \pm \frac{2\tilde{\alpha}}{\pi\sqrt{1+\tilde{\alpha}^2}} \tilde{k}_y \right)$. В 2D-системах линейный характер расщепления уровней сохраняется для всех значений k_y [29]. В исследуемой квазиодномерной системе данная закономерность с ростом k_y нарушается, что связано с наличием потенциала конфинмента в плоскости 2D-газа [30]. В результате это приводит к антикроссингу соседних ветвей спектра и к возможности появления участка с немонотонной зависимостью $E(k_y)$, что скажется, как будет показано ниже, на законе квантования кондактанса.

Так, необходимым условием появления пары экстремумов «максимум-минимум» является наличие в спектре двух точек перегиба, которые опре-

деляются выражением $\tilde{k}_y^\pm = \frac{\varepsilon}{2\tilde{\alpha}} \left(1 \pm \tilde{\alpha} \sqrt{\left(\frac{2\tilde{\alpha}}{\pi\varepsilon}\right)^{\frac{2}{3}} - 1} \right)$ (здесь $\frac{2\tilde{\alpha}}{\pi\varepsilon} > 1$). Достаточным условием – положительность первой производной в левой точке перегиба $E'(k_y^-) > 0$ и отрицательное ее значение в правой точке перегиба $E'(k_y^+) < 0$. Непосредственные вычисления приводят к выражениям $E'(k_y^\pm) = \frac{\varepsilon}{\tilde{\alpha}} \left(1 \mp \tilde{\alpha} \left(\left(\frac{2\tilde{\alpha}}{\pi\varepsilon}\right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right)^{\frac{3}{2}} \right)$. Видно, что в левой точке перегиба функция всегда оказывается возрастающей, в то время как в правой точке перегиба она убывает в случае, когда

$$\varepsilon < \frac{2\tilde{\alpha}^2}{\pi(1 + \tilde{\alpha}^{\frac{2}{3}})^{\frac{3}{2}}}. \quad (1.90)$$

Таким образом, сформулировано условие, при котором зависимость $E(k_y)$ становится немонотонной. Учитывая, что характерная величина спин-орбитального взаимодействия Рашбы в низкоразмерных полупроводниковых структурах имеет порядок $\alpha \sim 10^{-10} \div 10^{-9}$ эВ·см [29, 86, 87], получаем, что немонотонный участок в зависимости $E(k_y)$ (так называемый «bump») появляется при характерных напряжениях на туннельно-прозрачном барьере $V_0 \geq 6$ мэВ.

На рис.1.20 представлены результаты численного расчета спектра электронов в квазиодномерном канале с взаимодействием Рашбы для гетероструктур $AlGaAs/GaAs$ (рис.1.20(a)) и $GaAs/In_{0,23}Ga_{0,77}As$ (рис.1.20(b)). Из рис.1.20 видно, что для структуры $AlGaAs/GaAs$ наблюдается явление антикроссинга: стремящиеся пересечься ветви спектра отталкиваются друг от друга вследствие спин-орбитального взаимодействия. Для $GaAs/In_{0,23}Ga_{0,77}As$ явление антикроссинга также удаётся наблюдать. В данном случае соседние ветви спектра настолько сильно «чувствуют» друг друга (константа Рашбы достаточно велика), что у кривых спектра появляются точки минимума при $k_y \approx \pi/2a$.

Как следует из приведённых выше выражений, в рассматриваемой задаче появился новый параметр — амплитуда потенциала барьера U_0 (или V_0), с помощью которого можно изменять структуру энергетического спектра. Нетрудно видеть, что, изменяя таким образом зависимость энергии от продольного волнового вектора k_y , можно управлять проводимостью канала. Это утверждение иллюстрирует рис.1.21, на котором представлены электронные спектры в квазиодномерном канале, сформированном в гетеропереходе $AlGaAs/GaAs$ при раз-

личных значениях V_0 . Видно, что дополнительный максимум – «bump» – в области антикроссинга двух спектральных кривых $E(k_y)$ присутствует только при достаточно больших V_0 (рис.1.21(b)). Если энергия Ферми находится в районе этого максимума, то, как следует из рисунка, число мод, распространяющихся в одном направлении в канале, увеличивается. При этом, согласно формуле Ландауэра [88]

$$G \equiv G(E_F) = \frac{e^2}{h} M(E_F) \quad (1.91)$$

(где G – кондактанс, $M(E_F)$ – число распространяющихся мод, E_F – энергия Ферми), баллистическая проводимость квантового канала возрастает на величину $2e^2/h$. Таким образом, изменяя высоту барьера V_0 , можно контролировать число мод, распространяющихся в канале.

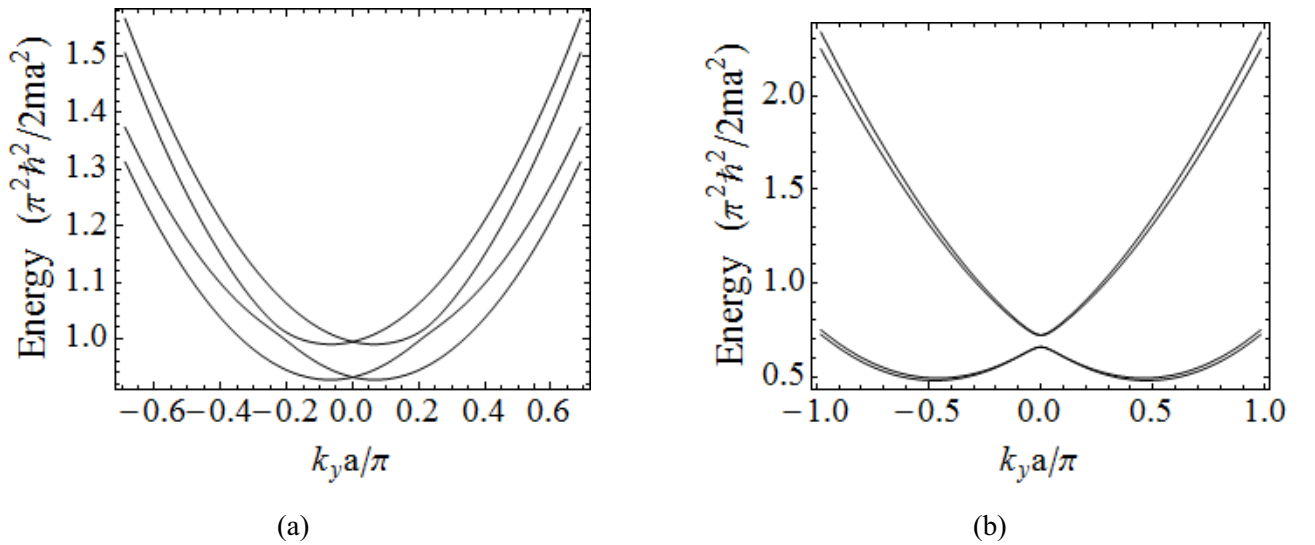


Рисунок 1.20: Энергетический спектр электронного газа в канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы с параметрами $a = 100$ нм, $b = 10$ нм: **(a)** $AlGaAs/GaAs$ ($\alpha = 2,5 \cdot 10^{-12}$ эВ·м, $V_0 = 18$ мэВ, $m = 0,067 \cdot m_0$, $\tilde{\alpha} = 0,219$, $\varepsilon = 0,1$); **(b)** $GaAs/In_{0,23}Ga_{0,77}As$ ($\alpha = 2,5 \cdot 10^{-11}$ эВ·м, $V_0 = 24$ мэВ, $m = 0,05 \cdot m_0$, $\tilde{\alpha} = 1,638$, $\varepsilon = 0,1$). При расчетах использовалось 10 пар нижних уровней.

На рис.1.22 приведена зависимость кондактанса (в единицах e^2/h) квазиодномерного канала от положения уровня Ферми. Рис.1.22(a) соответствует ситуации, изображённой на рис.1.21(a): каждая из четырёх ветвей спектра на участках с положительной производной $\partial E/\partial k > 0$ имеет по одной точке пересечения с прямой $E = E_F$ (отмечены на графике точками), что определяет скачко-

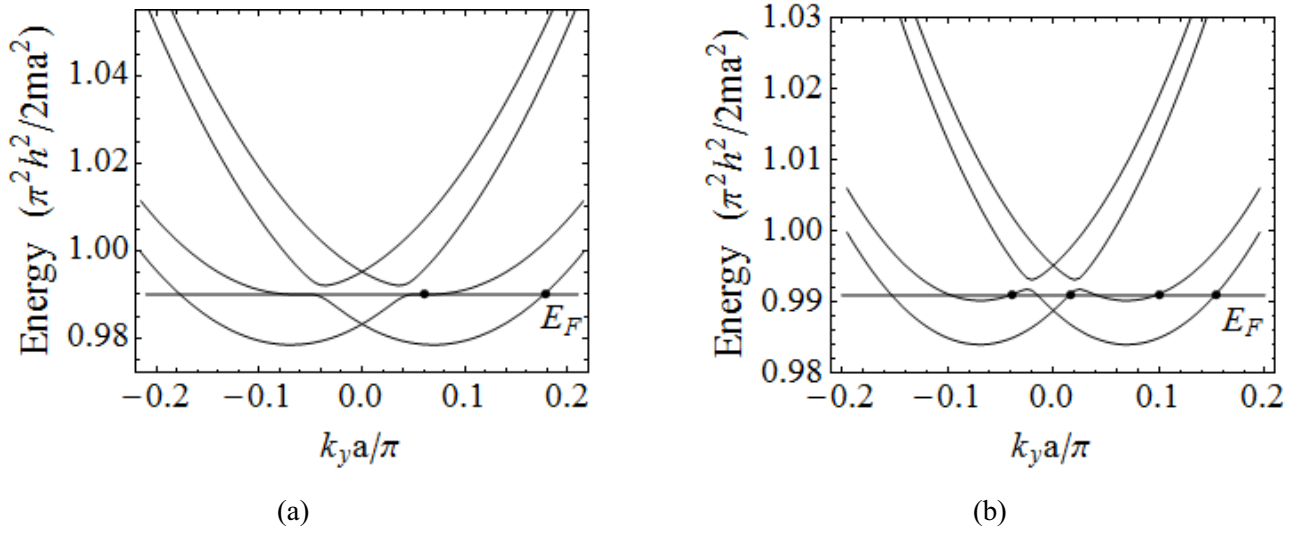


Рисунок 1.21: Энергетический спектр электронного газа в канале со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы при различных напряжениях на барьере для гетероструктуры $AlGaAs/GaAs$ ($\alpha = 2,5 \cdot 10^{-12}$ эВ·м, $a = 100$ нм, $b = 10$ нм, $m = 0,067 \cdot m_0$, $\tilde{\alpha} = 0,219$): (a) $V_0 = 95$ мэВ, $\varepsilon = 0,019$; (b) $V_0 = 180$ мэВ, $\varepsilon = 0,01$. При расчетах использовалось 10 пар нижних уровней.

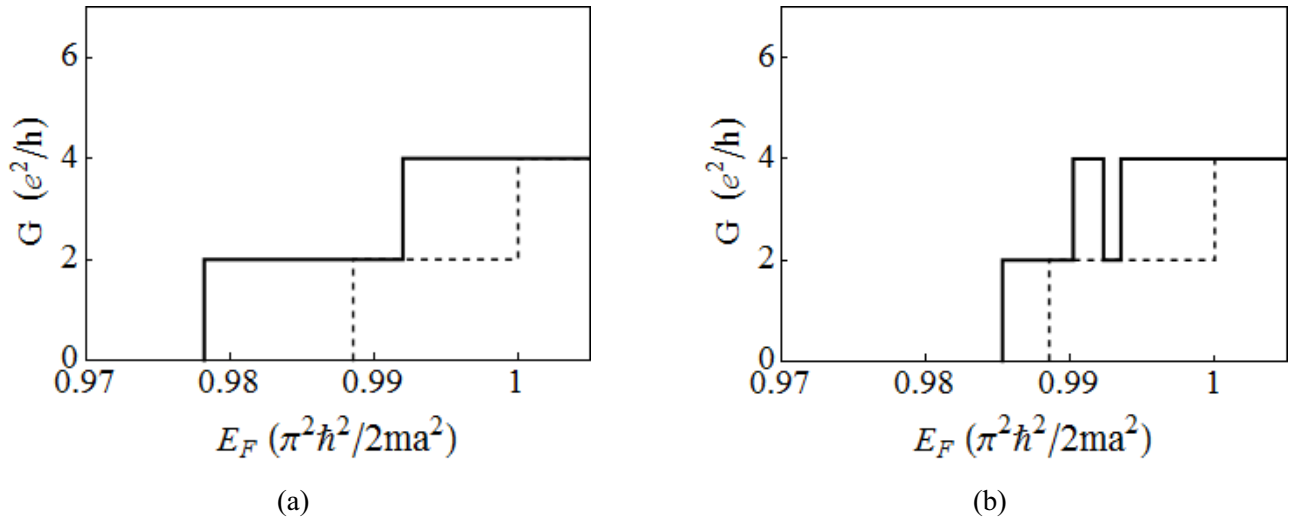


Рисунок 1.22: Кондактанс (в единицах e^2/h) квазиодномерного канала в структуре $AlGaAs/GaAs$ ($\alpha = 2,5 \cdot 10^{-12}$ эВ·м, $a = 100$ нм, $b = 10$ нм, $m = 0,067 \cdot m_0$, m_0 – масса свободного электрона, $\tilde{\alpha} = 0,219$) как функция энергии Ферми (в единицах $\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$): (a) $V_0 = 95$ мэВ, $\varepsilon = 0,019$; (b) $V_0 = 180$ мэВ, $\varepsilon = 0,01$. Пунктирной линией показана зависимость кондактанса от энергии Ферми в случае отсутствия спин-орбитального взаимодействия ($\alpha = 0$).

образное увеличение кондактанса с ростом энергии Ферми. Качественно другой случай реализуется, когда на одной из ветвей появляется пара экстремумов «максимум – минимум». В этой ситуации в определённом энергетическом интервале к баллистическому кондактансу добавляется два кванта проводимости $2e^2/h$ (рис.1.22(b)). Заметим, что ширина такого «пика» зависит от величины $\varepsilon = \pi\hbar^2/maU_0 \ll 1$, то есть от амплитуды потенциала U_0 , которой можно легко управлять.

Оказывается важным, что подобную ситуацию — возможность контролировать число квантов баллистической проводимости, а также управлять шириной «дополнительных» пиков кондактанса — можно реализовывать для широкого класса материалов. Так, для баллистического канала той же ширины, созданного на базе гетероперехода $GaAs/In_{0,23}Ga_{0,77}As$, где спин-орбитальное взаимодействие на порядок больше, нежели в структуре $AlGaAs/GaAs$, можно наблюдать тот же эффект — появление экстремумов «максимум-минимум» и, соответственно, дополнительного пика в баллистическом кондактансе.

Другим следствием наличия спин-орбитального взаимодействия является смещение зависимости $G(E_F)$ в область более низких энергий по сравнению со случаем, когда $\alpha = 0$ (пунктирная линия на рис.1.22). Этот эффект связан со сдвигом вниз энергетических уровней для случая $\alpha \neq 0$ (при $k_y a = 0$), а также линейным характером расщепления ветвей спектра при $k_y a \ll 1$.

Таким образом, нами исследованы особенности электронного энергетического спектра и кондактанса, возникающие вследствие наличия спин-орбитального взаимодействия в квазиодномерном канале, разделенном туннельно-прозрачным барьером, а именно: немонотонная зависимость энергетического спектра $E(k_y)$ от продольного волнового вектора, антикроссинг между ветвями спектра, дополнительные экстремумы и узкие пики баллистического кондактанса.

Глава 2

Динамика электронных волновых пакетов в 3D топологических изоляторах

Топологические изоляторы – новый класс веществ с удивительными свойствами: являясь диэлектриками в объеме, они обладают проводящей поверхностью. Из-за симметрии гамильтониана топологического изолятора, описывающего поверхностные состояния, по отношению к инверсии времени (*time-reversal symmetry*) рассеяние назад на немагнитной примеси для электрона запрещено [89]. Кроме того, электроны на поверхности 3D топологического изолятора – аналог электронов в графене. В этой связи представляет несомненный интерес исследование особенностей пространственно-временной эволюции волновых пакетов, сформированных на поверхности топологического изолятора. В данной главе изучается динамика волновых пакетов в 3D топологических изоляторах на примере селенида висмута Bi_2Se_3 .

2.1 Постановка задачи

Как показано в работе [46], гамильтониан в 3D топологическом изоляторе Bi_2Se_3 , записанный в виде матрицы 4×4 , имеет вид

$$\hat{H} = (C - D_1 \partial_z^2 + D_2 k^2) + \begin{pmatrix} h(A_1) & A_2 k_- \sigma_x \\ A_2 k_+ \sigma_x & h(-A_1) \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

где $h(A_1) = (M + B_1 \partial_z^2 - B_2 k^2) \sigma_z - i A_1 \partial_z \sigma_x$, σ_i – матрицы Паули, $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$ и $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, соответственно. Параметры гамильтониана (2.1) следующие [90]:

$$M = 0,28 \text{ эВ}, A_1 = 2,2 \text{ эВ} \cdot \text{Å}, A_2 = 4,1 \text{ эВ} \cdot \text{Å}, B_1 = 10 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^2, B_2 = 56,6 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^2, \\ C = -0,0068 \text{ эВ}, D_1 = 1,3 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^2, D_2 = 19,6 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^2.$$

Нетрудно убедиться, что поверхностные моды на границе массивного 3D топологического диэлектрика существуют только при выполнении неравенств для материальных параметров $M/B_1 > 0$, $|D_1| < |B_1|$. Эти неравенство выполняются, например, в Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 . В такой ситуации волновые пакеты, как и стационарные поверхностные состояния, являются топологически защищенными, поскольку для них рассеяние назад на немагнитной примеси запрещено [91].

Анализ структуры волновой функции и спектра поверхностных состояний удобно проводить с помощью так называемого эффективного гамильтониана \hat{H}_{eff} . Чтобы установить вид эффективного гамильтониана в полубесконечном 3D топологическом изоляторе необходимо, положив $k_x = k_y = 0$, найти собственные функции гамильтониана (2.1), удовлетворяющие граничному условию $\Psi(0) = 0$. После того, как эти состояния найдены, нужно вычислить матричные элементы гамильтониана (2.1): $\hat{H}_{eff}^{\alpha\beta} = \langle \Psi_\alpha | \hat{H} | \Psi_\beta \rangle$. В результате имеем [92]:

$$\hat{H}_{eff}(k) = \hbar v_F (k_y \hat{\sigma}_x - k_x \hat{\sigma}_y). \quad (2.2)$$

Полученный эффективный гамильтониан (2.2) совпадает с гамильтонианом спин-орбитального взаимодействия Рашбы, при этом роль константы спин-орбитального взаимодействия играет скорость Ферми v_F . Таким образом, динамика электронных волновых пакетов на поверхности полубесконечного 3D топологического изолятора будет иметь те же особенности, что и в двумерной системе со взаимодействием Рашбы. А именно, начальный пакет с произвольной ориентацией спина в процессе эволюции будет расщепляться на две части, распространяющиеся в противоположных направлениях со скоростями $\pm v_F$ [18].

Теперь рассмотрим эволюцию электронного пакета в тонкой пленке 3D топологического изолятора. В этом случае эффективный гамильтониан, описывающий поверхностные состояния вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна, можно найти, также сначала полагая $k_x = k_y = 0$ в (2.1) и затем решая уравнение Шредингера с граничными условиями $\Psi(z = \pm L/2) = 0$ (L – толщина пленки). В результате, во втором порядке по k_x и k_y эффективный гамильтониан будет иметь следую-

щую матричную форму [46]:

$$\hat{H}_{eff} = \begin{pmatrix} h_+(k) & 0 \\ 0 & h_-(k) \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

где

$$\hat{h}_{\tau_z}(k) = E_0 - Dk^2 - \hbar v_F(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) + \tau_z(\Delta/2 - Bk^2) \hat{\sigma}_z. \quad (2.4)$$

Здесь k_x, k_y – хорошие квантовые числа, $\tau_z = \pm 1$, что связано с двукратным вырождением спектра: разные значения величины τ_z отвечают различным ориентациям спиновой плотности стационарных состояний. Величины E_0, D, v_F, B и Δ являются функциями толщины пленки. Явную зависимость этих величин от толщины пленки L рассчитана в работе [46]. Константа Δ в эффективном гамильтониане (2.4) определяет энергетическую щель в спектре поверхностных состояний. Появление энергетической щели в спектре поверхностной моды (в Γ -точке зоны Бриллюэна) связано, очевидно, с туннелированием носителей между двумя поверхностными состояниями, лежащими на противоположных границах пленки. Если волновые функции на двух противоположных границах перекрываются, то величина энергетической щели, вообще говоря, экспоненциально зависит от толщины пленки. При изменении толщины пленки 3D топологического изолятора могут также наблюдаться слабые осцилляции энергетической щели. Слагаемое Bk^2 в (2.4) ответственно за спин-орбитальное взаимодействие.

Энергетический спектр гамильтониана (2.4) и его собственные функции с нормой $\|U_{\pm}(k)\|$ имеют следующий вид:

$$E_{\pm, k_x, k_y} = E_0 - Dk^2 \pm \hbar\omega(k), \quad (2.5)$$

$$\varphi_{\pm, k_x, k_y}(x, y) = \frac{\exp(ik_x x + ik_y y)}{2\pi} |U(k)\rangle_{\pm}, \quad (2.6)$$

$$|U(k)\rangle_{\pm} = \frac{1}{\|U_{\pm}(k)\|} \begin{pmatrix} (\Delta/2 - Bk^2)\tau_z \pm \hbar\omega(k) \\ -i\hbar v_F k_+ \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

где знаки «+» и «-» отвечают зоне проводимости и валентной зоне спектра соответственно, $\omega(k) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{(\Delta/2 - Bk^2)^2 + (\hbar v_F k)^2}$ – частота перехода между зоной проводимости и валентной зоной.

Спиновые плотности $\bar{s}_i(x, y, t) = \frac{\hbar}{2} \langle \varphi_{\pm, k_x, k_y}(x, y) | \sigma_i | \varphi_{\pm, k_x, k_y}(x, y) \rangle$ в поверхностных зонах могут иметь различный знак. Причем, при малых значениях k , т.е. вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна, направление спина определяется знаком энергетической щели Δ , а при больших значениях k зависит от знака квадратичной по k величины спин-орбитального взаимодействия. Точку обращения \bar{s}_z в нуль можно найти из условия $|\Delta| = 2|B|k^2$, что реализуется лишь в случае, когда константы Δ и B имеют одинаковый знак. Так, если толщина пленки равна 32 \AA , то, согласно результатам работы [46], смена знака происходит в точке $k = 0,045 \text{ \AA}^{-1}$ (см. рис.2.1).

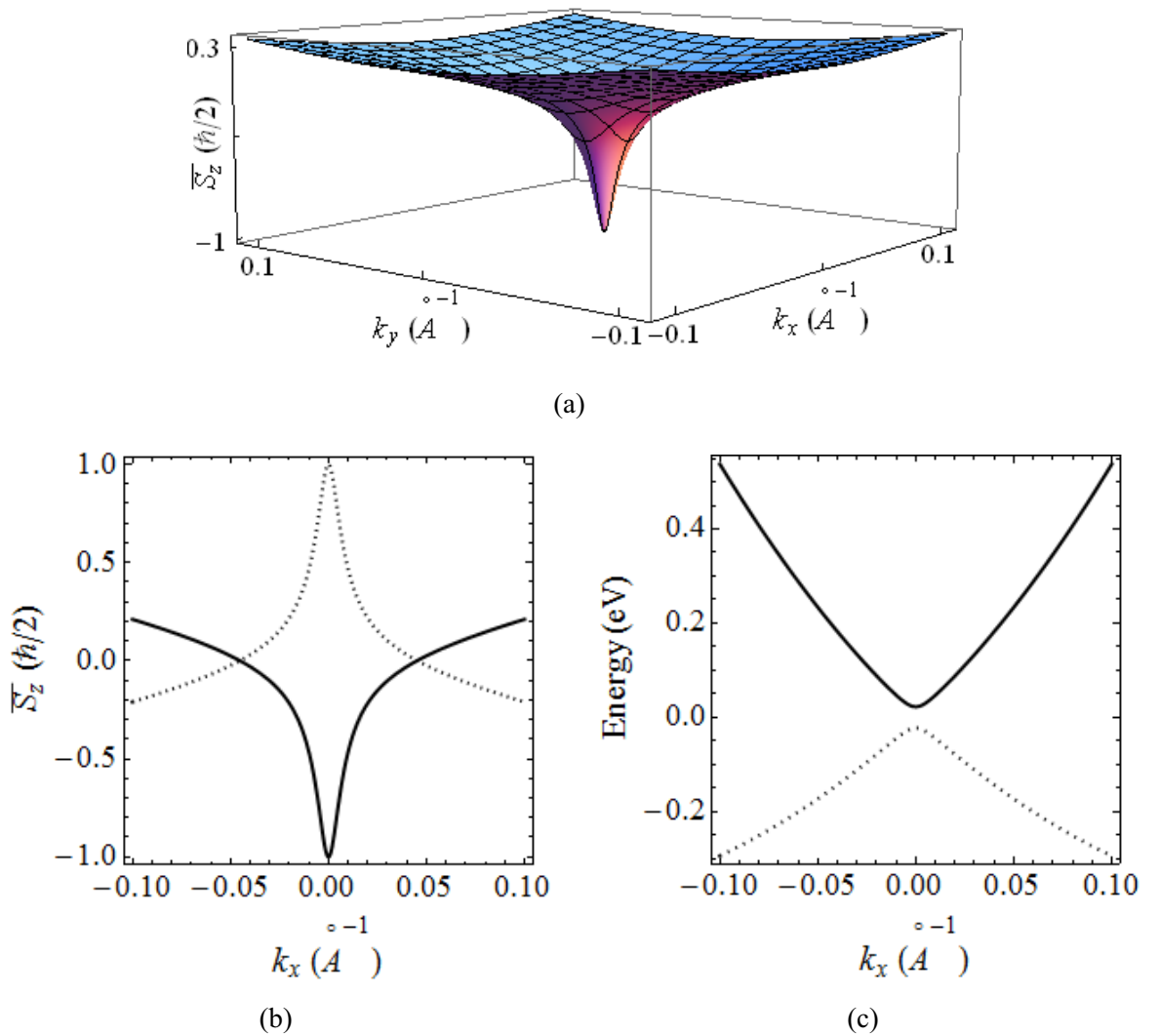


Рисунок 2.1: (a) Спиновая плотность $\bar{s}_z(k_x, k_y)$ стационарных состояний зоны проводимости гамильтониана (2.4) для $\tau_z = 1$. (b) Сечение этой функции плоскостью $k_y = 0$. (c) Энергетический спектр. Сплошная линия отвечает состояниям зоны проводимости, пунктирная – состояниям валентной зоны (на рис. (a) не показана). Параметры гамильтониана заимствованы из работы [46]: толщина пленки $L = 32 \text{ \AA}$, $\Delta = -0,045 \text{ эВ}$, $B = -11 \text{ эВ} \cdot \text{\AA}^2$, $D = -12,2 \text{ эВ} \cdot \text{\AA}^2$.

2.2 Эволюция квазиодномерных электронных волновых пакетов в 3D топологическом изоляторе Bi_2Se_3

Рассмотрим для простоты динамику одномерного пакета, когда $k_y = 0$, $k_x \equiv k$. Подобные пакеты, построенные из поверхностных состояний верхней и нижней зон с поляризацией спина, соответствующей $\tau_z = +1$, можно возбуждать с помощью электромагнитного излучения с определенной круговой поляризацией. Тогда эволюция произвольного начального состояния $\Psi(x, 0)$ во времени задается выражением

$$\Psi(x, t) = \sum_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} C_{\pm}(k) \varphi_{\pm, k}(x) \exp\left(-\frac{iE_{\pm, k}t}{\hbar}\right) dk, \quad (2.8)$$

в котором коэффициенты $C_{\pm}(k)$ определяются функцией начального состояния:

$$C_{\pm}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \langle U(k) |_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx) \Psi(x, 0) dx. \quad (2.9)$$

Здесь суммирование по \pm означает учет вклада в волновой пакет стационарных состояний как из зоны проводимости, так и из валентной зоны энергетического спектра $E_{\pm, k}$ (2.5).

Пусть начальный волновой пакет имеет гауссову форму с поляризацией спина по оси z :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{d\sqrt{\pi}}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{x^2}{2d^2}\right), \quad (2.10)$$

где d – ширина пакета. Эволюция такого волнового пакета (с $\tau_z = +1$) во времени описывается, согласно (2.8), выражением

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x, t) \\ \Psi_2(x, t) \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{d}{2\pi^{3/2}}} \exp\left(-\frac{iE_0t}{\hbar}\right) \times \\ \times \sum_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{\pm}(k) \exp\left(i\left(kx + (Dk^2 \mp \hbar\omega(k))t/\hbar\right)\right) dk, \quad (2.11)$$

где плавный неосциллирующий множитель под знаком интеграла есть

$$\Phi_{\pm}(k) = \frac{((\Delta/2 - Bk^2)\tau_z \pm \hbar\omega(k)) \exp(-(kd)^2/2)}{\|U_{\pm}(k)\|^2} \times \begin{pmatrix} (\Delta/2 - Bk^2)\tau_z \pm \hbar\omega(k) \\ -i\hbar v_F k \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Интеграл в выражении (2.11) можно рассчитать с помощью метода стационарной фазы [93]. Действительно, при больших значениях t и x фаза в показателе экспоненты быстро изменяется при небольшом изменении переменной интегрирования k . Быстрые осцилляции действительной и мнимой частей подынтегральной функции приводят к взаимному сокращению вкладов. При этом основной вклад возникает от тех областей, где показатель экспоненты изменяется медленно. Такие экстремальные точки показателя экспоненты находятся из условия:

$$\frac{\partial}{\partial k} \left(kx + \frac{Dtk^2}{\hbar} \mp t\omega(k) \right) = 0. \quad (2.13)$$

Тогда значение интеграла можно приближенно найти, вынося функцию $\Phi_{\pm}(k)$ в экстремальной точке за знак интеграла. Так, в частности, при $\Delta = 0$, $B = 0$, когда фаза экстремальна в точках $k = \frac{(x \mp v_F t)\hbar}{2|D|t}$, мы получаем:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x, t) &= f_+(x, t) + f_-(x, t), \\ \Psi_2(x, t) &= i(f_+(x, t) - f_-(x, t)), \end{aligned} \quad (2.14)$$

где функции $f_{\pm}(x, t)$ определены как

$$f_{\pm}(x, t) = \sqrt{\frac{\hbar d}{8i|D|\sqrt{\pi t}}} \exp \left(-\frac{((x \pm v_F t)\hbar d)^2}{8|D|^2 t^2} + i\frac{(x \pm v_F t)^2 \hbar}{4|D|t} \right). \quad (2.15)$$

Отсюда следует, что начальный волновой пакет расщепляется на две одинаковые части, расплывающиеся и движущиеся в разные стороны со скоростями $\pm v_F$. При этом $|\Psi_1|^2$ и $|\Psi_2|^2$ осциллируют с периодом $\Delta x = \frac{2\pi|D|}{\hbar v_F}$, однако, их сумма не содержит осцилляций. Этот результат совпадает с полученным ранее в работе [18].

В топологическом изоляторе, когда параметры гамильтониана B и Δ не равны нулю, приближенное выражение для точек стационарной фазы в выражении

(2.13) находится аналитически в области малых значений k :

$$k_{\mp} = -\frac{\hbar x}{2t \left(D \mp \frac{(\hbar v_F)^2 - B\Delta}{|\Delta|} \right)}. \quad (2.16)$$

Данное разложение справедливо для достаточно широких волновых пакетов ($d \gg d_c = \frac{\hbar v_F}{|\Delta|} \sqrt{|1 + \frac{B\Delta}{B\Delta - \hbar v_F^2}|}$). Для них с помощью метода стационарной фазы удается приближенно вычислить интеграл (2.11), после чего становится ясно, что широкий волновой пакет практически не расщепляется на две части, а период осцилляций электронной плотности теперь зависит от x и t и равен

$$\Delta x \approx \frac{2\pi t}{x\hbar|\Delta|} \frac{(D\Delta)^2 - ((\hbar v_F)^2 - B\Delta)^2}{(\hbar v_F)^2 - B\Delta}. \quad (2.17)$$

Видно, что с ростом x период осцилляций уменьшается. Это иллюстрирует рис.2.2, на котором представлен результат численного расчета электронной плотности $\rho = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$ пакета с начальной формой (2.10) и шириной $d = 500 \text{ \AA} \gg d_c \simeq 90 \text{ \AA}$. На графике отчетливо видны характерные осцилляции, период которых можно оценить с помощью выражения (2.17).

В случае узкого волнового пакета ($d \leq d_c$) расчет электронной плотности и спиновой плотности может быть выполнен численно. Учитывая то обстоятельство, что в таком пакете представлен достаточно широкий диапазон волновых

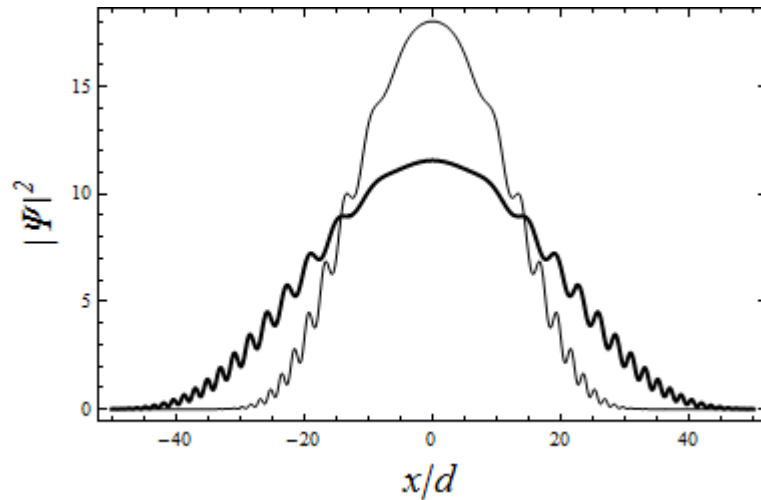


Рисунок 2.2: Электронная плотность в широком одномерном волновом пакете с $d = 500 \text{ \AA}$ и начальной формой (2.10) в моменты времени $t = 3,6 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ (сплошная линия) и $t = 5,7 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ (толстая сплошная линия). Параметры гамильтониана те же, что на рис.2.1.

векторов, определение точек стационарной фазы в (2.16) оказывается некорректным. С другой стороны, наличие больших волновых векторов приводит к тому, что скорость разбегания волновых пакетов оказывается больше скорости их расплывания, в результате чего наблюдается расщепление первоначального пакета (2.10) на две части, движущиеся в разных направлениях. На рис.2.3 представлен результат численного расчета электронной плотности узкого волнового пакета с начальным размером $d = 50 \text{ \AA}$ (параметры гамильтониана здесь те же, что на рис.2.1).

В свою очередь, спиновая плотность $\bar{s}_z(x, t) = \frac{\hbar}{2} \langle \varphi_k(x) | \hat{\sigma}_z | \varphi_k(x) \rangle$ для узкого волнового пакета для трех различных моментов времени представлена на рис.2.3. Видно, что она является знакопеременной функцией. Это, очевидно, связано с тем, что стационарная спиновая плотность в зоне Бриллюэна меняет знак в точке $k = \sqrt{\frac{\Delta}{2B}}$ (здесь $\Delta/B > 0$). В результате каждая часть распавшегося начального волнового пакета, в свою очередь, с течением времени расщепляется еще на две части, которые имеют строго определенный знак спиновой плотности \bar{s}_z . Наоборот, при тех толщинах пленки топологического изолятора, когда $\Delta/B < 0$, спиновая плотность в каждый момент времени имеет одинаковый знак.

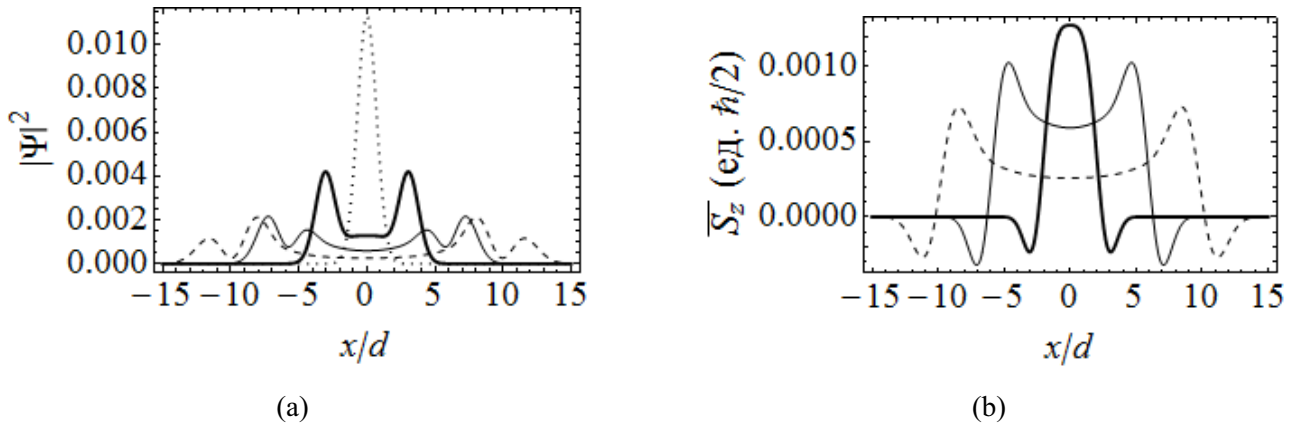


Рисунок 2.3: Электронная плотность (a) и спиновая плотность (b) в узком волновом пакете с $d = 50 \text{ \AA}$ и начальной формой (2.10) в моменты времени $t = 0$ с (показана точками), $t = 2,4 \cdot 10^{-14}$ с (толстая сплошная линия), $t = 5,7 \cdot 10^{-14}$ с (сплошная линия), $t = 8,9 \cdot 10^{-14}$ с (пунктирная линия). Параметры гамильтониана те же, что на рис.2.1. Спиновая плотность при $t = 0$ не показана.

2.3 Эволюция двумерных электронных волновых пакетов в 3D топологическом изоляторе Bi_2Se_3

Волновая функция двумерного волнового пакета на поверхности 3D топологического изолятора, сформированного из стационарных состояний верхней и нижней зон, с поляризацией спина, соответствующей $\tau_z = +1$, в произвольный момент времени имеет вид

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} C_{\pm}(k_x, k_y) \varphi_{\pm, k_x, k_y}(x, y) \exp\left(-\frac{iE_{\pm, k_x, k_y} t}{\hbar}\right) dk_x dk_y, \quad (2.18)$$

в котором коэффициенты $C_{\pm}(k_x, k_y)$ определяются функцией начального состояния волнового пакета:

$$C_{\pm}(k_x, k_y) = \frac{1}{2\pi} \langle U(k) |_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i(k_x x + k_y y)) \Psi(x, y, 0) dx dy, \quad (2.19)$$

где двухкомпонентная вектор-строка $\langle U(k) |_{\pm}$ определена в (2.7).

Пусть начальный волновой пакет имеет гауссову форму с произвольной поляризацией спина и начальным волновым вектором k_0 в направлении оси x :

$$\Psi(x, y, 0) = C \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{x^2}{2d^2} - \frac{y^2}{2d^2} + ik_0 x\right), \quad (2.20)$$

где d – ширина пакета, C – нормировочный коэффициент. Тогда эволюция такого пакета во времени описывается, согласно (2.18), выражением

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x, y, t) \\ \Psi_2(x, y, t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} K(k_x, k_y, t) \exp(ik_x x + ik_y y) dk_x dk_y, \quad (2.21)$$

где $K(k_x, k_y, t)$ – волновая функция в импульсном представлении:

$$K(k_x, k_y, t) = \begin{pmatrix} K_1(k_x, k_y, t) \\ K_2(k_x, k_y, t) \end{pmatrix} = Cd^2 \sum_{s=\pm 1} \frac{\exp\left(-\frac{(k_x-k_0)^2 d^2}{2} - \frac{k_y^2 d^2}{2}\right)}{\|U_s(k)\|^2} \times \\ \times \left(c_1 \left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2 + s\hbar\omega(k) \right) + ic_2 \hbar v_F (k_x - ik_y) \right) \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{2} - Bk^2 + s\hbar\omega(k) \\ -i\hbar v_F (k_x + ik_y) \end{pmatrix} \times \\ \times \exp\left(\frac{-iE_{k_x, k_y, st}}{\hbar}\right). \quad (2.22)$$

Двукратный интеграл по k_x и k_y в формуле (2.21) удается свести к однократному, перейдя в полярную систему координат $k_x = k \cos \varphi$, $k_y = k \sin \varphi$ (здесь $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ – модуль волнового вектора, а φ – соответствующий полярный угол в плоскости (k_x, k_y)) и вычислив интеграл по φ с помощью формулы [111]

$$\int_0^{2\pi} \exp(i\mu \cos(\varphi - \alpha) + n \cos(\varphi) + ig\varphi) d\varphi = \\ = 2\pi \left(\frac{n^2 + \mu^2 \cos(2\alpha) + i\mu^2 \sin(2\alpha)}{n^2 + \mu^2 + 2n\mu \sin \alpha} \right)^{\frac{g}{2}} I_g \left(\sqrt{n^2 - \mu^2 + i2\mu n \cos \alpha} \right), \quad (2.23)$$

где $\mu, n > 0$, $I_g(z)$ – модифицированная функция Бесселя порядка g , α – угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{r} . Имеем:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x, y, t) \\ \Psi_2(x, y, t) \end{pmatrix} = Cd^2 \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar} - \frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \times \\ \times \sum_{s=\pm 1} \int_0^\infty k dk \frac{\left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2 + s\hbar\omega\right)}{\|U\|_s^2} \exp\left(-\frac{k^2 d^2}{2} + \frac{iDk^2 t}{\hbar} - is\omega t\right) \times \\ \times \begin{pmatrix} c_1 \left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2 + s\hbar\omega\right) J_0(kz) + c_2 \hbar v_F k \sqrt{\frac{r^2 + 2k_0 d^2 y + k_0^2 d^4}{(x + iy)^2 + k_0^2 d^4}} J_1(kz) \\ -\hbar v_F k \left(c_1 \sqrt{\frac{(x + iy)^2 + k_0^2 d^4}{r^2 + 2k_0 d^2 y + k_0^2 d^4}} J_1(kz) - c_2 \frac{\hbar v_F k}{\left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2 + s\hbar\omega\right)} J_0(kz) \right) \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

где $z = \sqrt{r^2 - 2ik_0 d^2 x - k_0^2 d^4}$.

Интегрирование по k в (2.24) проводилось численно. В результате в различные моменты времени визуализированы функции плотности вероятности, а также средние спиновые плотности $\bar{s}_z(x, y)$, $\bar{s}_x(x, y)$ и $\bar{s}_y(x, y)$ для двумерных волновых пакетов, имеющих в начальный момент времени простую гауссову форму и различную ориентацию начального спина (2.20) (рис.2.4, 2.5).

Так, на рис.2.4(a) представлена плотность вероятности для волнового пакета (2.20) с $k_0 = 0$ и начальной поляризацией спина $(1, 0)^T$ в моменты времени $t = 22,6$ пс. Видно, что первоначально цилиндрически симметричный волновой пакет в процессе эволюции сохраняет эту симметрию. Действительно, нетрудно заметить, что гамильтониан (2.4) коммутирует с оператором полного спина $\hat{J}_z = \hat{l}_z + \frac{\hbar}{2}\sigma_z$. В то же время, можно показать, что волновая функция рассматриваемого начального состояния является собственной функцией оператора \hat{J}_z с собственным значением $\frac{\hbar}{2}$. Поэтому и в любой момент времени $t > 0$ должно выполняться равенство

$$\hat{J}_z \begin{pmatrix} f_1(r, \theta, t) \\ f_2(r, \theta, t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} f_1(r, \theta, t) \\ f_2(r, \theta, t) \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

приводящее к системе уравнений на компоненты волновой функции в произвольный момент времени:

$$\begin{cases} \hat{l}_z f_1(r, \theta, t) = 0, \\ \hat{l}_z f_2(r, \theta, t) = \hbar f_2(r, \theta, t). \end{cases} \quad (2.26)$$

Из первого равенства в (2.26) следует, что верхняя компонента волновой функции в любой момент времени не зависит от полярного угла θ : $f_1(r, t)$, а из второго – что нижняя компонента равна $f_2(r, \theta, t) = \phi(r, t)e^{i\theta}$. Таким образом, для электронной плотности вероятности $|\Psi|^2 = |f_1(r, t)|^2 + |\phi(r, t)|^2$ (а также для спиновой плотности $\bar{s}_z = \frac{\hbar}{2}(|f_1(r, t)|^2 - |\phi(r, t)|^2)$) в произвольный момент времени должна сохраняться первоначальная аксиальная симметрия волнового пакета (см. рис.2.4(a), 2.4(b)). В то же время, как видно из рис.2.4(c), 2.4(d), спиновые плотности S_x и S_y имеют сложную структуру (можно показать, что при данной пространственно-спиновой симметрии начального волнового пакета спиновая плотность S_x переходит в S_y путем поворота вокруг оси z на угол $\frac{\pi}{2}$).

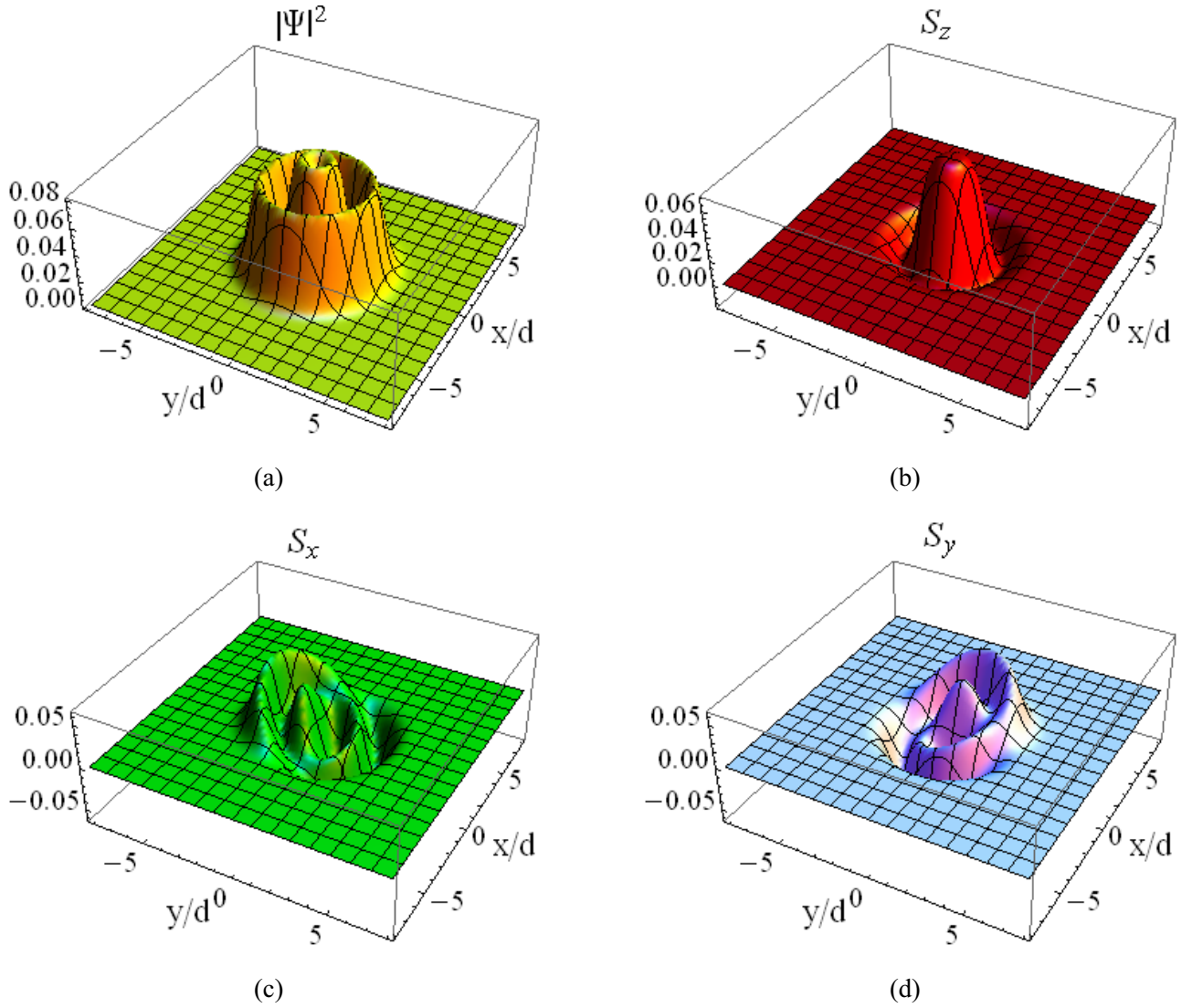


Рисунок 2.4: Двумерный волновой пакет (2.24) с начальной шириной $d = 50 \text{ \AA}$, $k_0 = 0$ и поляризацией $(1, 0)^T$ с параметрами пленки топологического изолятора $L = 32 \text{ \AA}$, $D = -12,2 \text{ эВ} \cdot \text{ \AA}^2$, $B = -11 \text{ эВ} \cdot \text{ \AA}^2$ и $\Delta = -0,045 \text{ эВ}$ ($v_F = 6,63 \cdot 10^{15} \text{ \AA}/\text{с}$) в момент времени $t = 22,6 \text{ пс}$: (a) электронная плотность; (b) спиновая плотность S_z ; (c) спиновая плотность S_x ; (d) спиновая плотность S_y .

Далее, на рис.2.5(a) представлена электронная плотность вероятности и спиновая плотность S_z волнового пакета, имеющего начальную поляризацию спина по оси x и те же остальные параметры, что волновой пакет на рис.2.4. Видно, что в этом случае первоначально аксиально симметричный гауссовский волновой пакет с течением времени теряет эту симметрию. Как и для случая квазиодномерных пакетов, наличие в функции начального состояния волнового пакета

двух энергетических зон приводит со временем к его расщеплению на две части. При этом, очевидно, каждая часть имеет преимущественно определенный знак спиновой поляризации (см. рис.2.4(b), рис.2.5(b)).

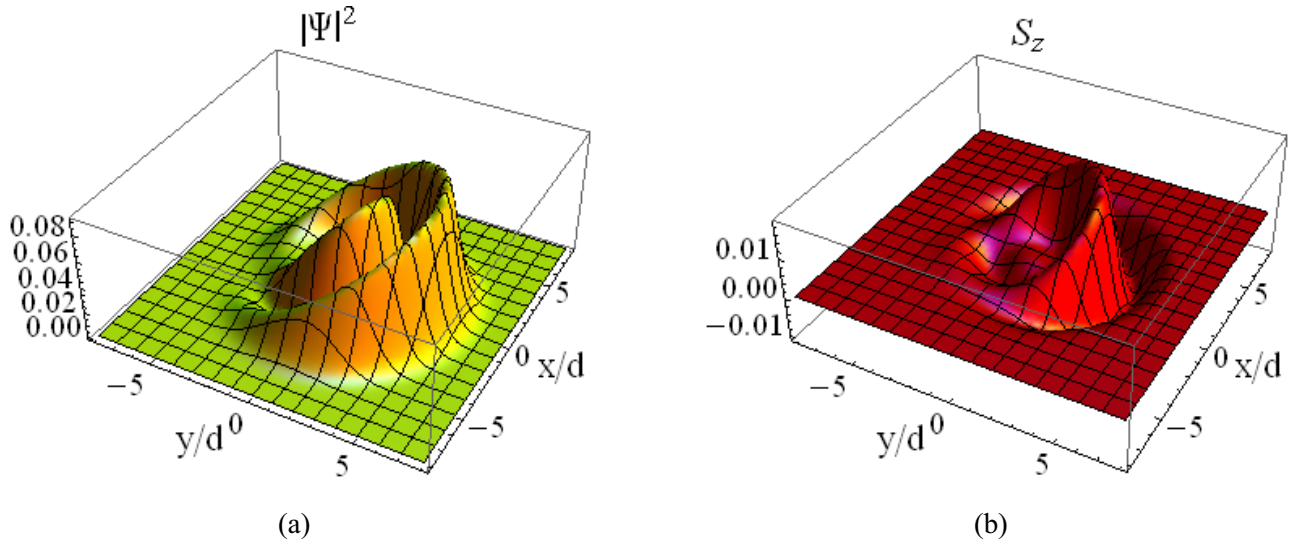


Рисунок 2.5: Двумерный волновой пакет (2.24) с начальной шириной $d = 50 \text{ \AA}$, $k_0 = 0$ и поляризацией $(1, 1)^T$ с параметрами пленки топологического изолятора $L = 32 \text{ \AA}$, $D = -12,2 \text{ эВ} \cdot \text{ \AA}^2$, $B = -11 \text{ эВ} \cdot \text{ \AA}^2$ и $\Delta = -0,045 \text{ эВ}$ ($v_F = 6,63 \cdot 10^{15} \text{ \AA}/\text{с}$) в момент времени $t = 37,7 \text{ пс}$: (a) электронная плотность; (b) спиновая плотность S_z .

Пространственное распределение электронной плотности вероятности, а также спиновой плотности S_z для волнового пакета с начальным импульсом вдоль оси x , равным $k_0 d = 2$, представлены на рис.2.6. Наличие у пакета импульса определяет бóльшую скорость его расщепления на две части. Из рис.2.6(a) видно, что начальный волновой пакет содержит примерно поровну стационарных состояний, отвечающих различным ветвям спектра. Кроме того, каждый из подпакетов, как и ранее, является спин-поляризованным (рис.2.6(b)).

В случае, когда волновой пакет составлен из состояний двух энергетических зон, его пространственно-временная эволюция должна сопровождаться явлением *Zitterbewegung*. Так, пусть начальный импульс волнового пакета $\hbar k_0$ направлен, например, вдоль оси x . Расчет среднего значения оператора координаты оказывается удобным производить в импульсном представлении. Вычисления

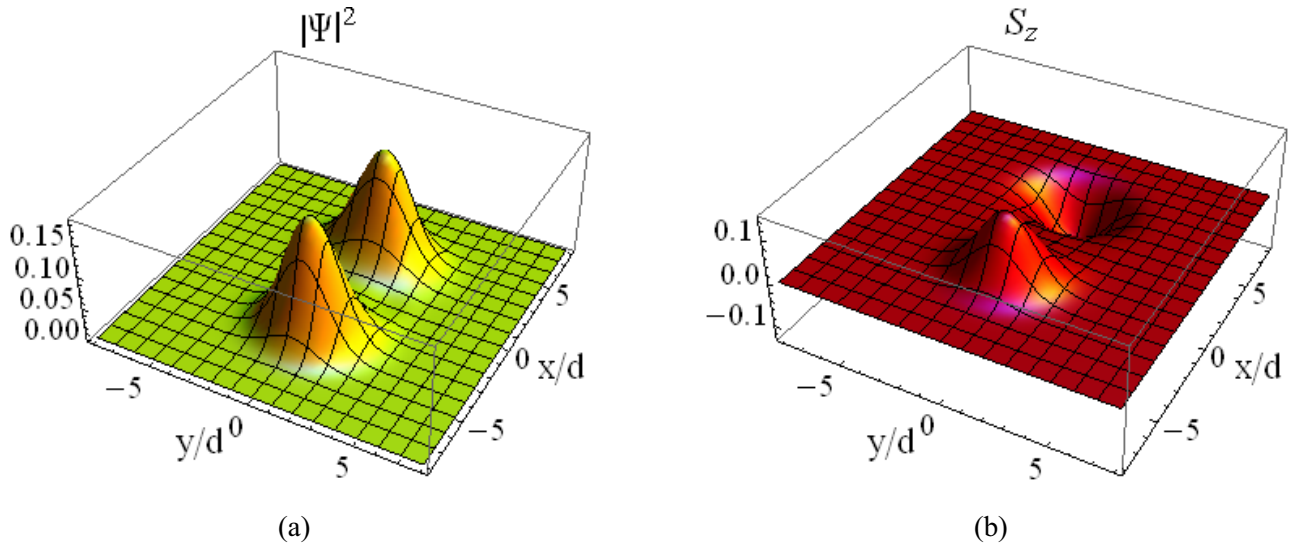


Рисунок 2.6: Двумерный волновой пакет (2.24) с начальной шириной $d = 500 \text{ \AA}$, $k_0 d = 2$ и поляризацией $(1, 1)^T$ с параметрами пленки топологического изолятора $L = 32 \text{ \AA}$, $D = -12,2 \text{ эВ} \cdot \text{\AA}^2$, $B = -11 \text{ эВ} \cdot \text{\AA}^2$ и $\Delta = -0,045 \text{ эВ}$ ($v_F = 6,63 \cdot 10^{15} \text{ \AA}/\text{с}$) в момент времени $t = 45,2 \text{ пс}$: (a) электронная плотность; (b) спиновая плотность S_z .

$\bar{y}(t)$ сводятся к нахождению среднего значения оператора координаты $\hat{y} = i \frac{\partial}{\partial k_y}$:

$$\bar{y}(t) = i \iint_{-\infty}^{\infty} K^\dagger(k_x, k_y, t) \frac{\partial}{\partial k_y} K(k_x, k_y, t) dk_x dk_y, \quad (2.27)$$

где функции $K(k_x, k_y, t)$ определены в (2.22).

Вычисления можно значительно упростить, воспользовавшись тем, что волновые функции (2.22) представляются в виде суммы четного и нечетного по k_y слагаемых. Так, для начальной поляризации волнового пакета по оси z (то есть при $c_1 = 1$, $c_2 = 0$ или наоборот) выражение (2.27) после арифметических преобразований сводится к максимально простому виду:

$$\bar{y}(t) = (c_2^2 - c_1^2) \frac{(\hbar v_F d)^2}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\omega(k)t)}{(\hbar \omega(k))^2} e^{-(k_x - k_0)^2 d^2 - k_y^2 d^2} k_x dk_x dk_y. \quad (2.28)$$

Из полученного выражения ясно, что при $k_0 = 0$ подынтегральная функция оказывается нечетной по k_x , что приводит к исчезновению ZB-осцилляций ($\bar{y}(t) = 0$). Этот результат можно объяснить рассмотренным ранее свойством гауссовского волнового пакета с начальной поляризацией спина вдоль оси z :

плотность вероятности такого пакета с течением времени остается цилиндрически симметричной. Вследствие этого среднее значение координаты центра пакета в произвольный момент времени строго равно нулю.

Для значений $k_0 \neq 0$ интегралы в (2.28) удобно вычислять в полярных координатах. Учитывая, что $k_x = k \cos \varphi$, $k_y = k \sin \varphi$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, имеем:

$$\bar{y}(t) = (c_2^2 - c_1^2) \frac{(\hbar v_F d)^2}{\pi} e^{-k_0^2 d^2} \int_0^\infty \frac{(\sin^2(\omega(k)t))}{(\hbar \omega(k))^2} e^{-k^2 d^2} k^2 dk \int_0^{2\pi} e^{2kk_0 d^2 \cos \varphi} \cos \varphi d\varphi. \quad (2.29)$$

Здесь интеграл по φ вычисляется с помощью формулы (2.23). В результате нетрудных математических преобразований получаем:

$$\bar{y}(t) = 2i(c_1^2 - c_2^2)(\hbar v_F d)^2 e^{-k_0^2 d^2} \int_0^\infty \frac{\sin^2(\omega(k)t)}{(\hbar \omega(k))^2} e^{-k^2 d^2} k^2 J_1(2ikk_0 d^2) dk. \quad (2.30)$$

Численный расчет зависимости $\bar{y}(t)$ по формуле (2.30) для различных значений величины начального импульса волнового пакета $\hbar k_0$ представлен на рис.2.7 для тех же параметров пленки топологического изолятора, что на рис.2.4.

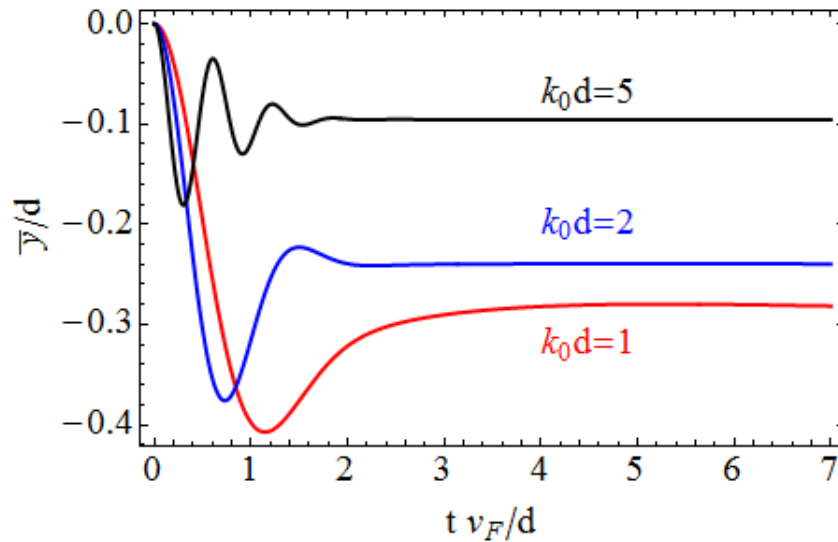


Рисунок 2.7: Среднее значение координаты $\bar{y}(t)$ от времени для гауссовского волнового пакета с начальной поляризацией спина по оси z с $d = 50 \text{ \AA}$, толщина пленки $L = 32 \text{ \AA}$.

В случае начальной поляризации гауссовского пакета вдоль оси x (то есть при $c_1 = c_2 = 1$) вычисления приводят к следующей зависимости:

$$\bar{y}(t) = v_F d^2 e^{-k_0^2 d^2} \int_0^\infty e^{-k^2 d^2} \frac{\sin(2\omega(k)t)}{\omega(k)} \left(\frac{I_1(2kk_0 d^2)}{kk_0 d^2} + I_0(2kk_0 d^2) \right) k dk + Vt, \quad (2.31)$$

где скорость смещения центра пакета V определяется интегралом:

$$V = \frac{v_F}{k_0} e^{-k_0^2 d^2} \int_0^\infty e^{-k^2 d^2} \frac{((\hbar v_F)^2 - 2B(\frac{\Delta}{2} - Bk^2))}{(\hbar\omega)^2} I_1(2kk_0 d^2) k^2 dk. \quad (2.32)$$

Из полученного выражения видно, что волновой пакет, в отличие случая с начальной поляризацией спина вдоль оси z , смещается с постоянной скоростью V в направлении, перпендикулярном его начальному импульсу. При этом движение пакета сопровождается осцилляциями с частотой порядка $2\omega(k_0)$, которые наблюдаются на начальном этапе эволюции, рис.2.8. Важно отметить, что в данном случае даже при $k_0 = 0$ оказывается, что $\bar{y}(t) \neq 0$ (что связано, в том числе, с отсутствием симметрии относительно одновременной замены $x \rightarrow -x$ и $y \rightarrow -y$ для электронной плотности вероятности пакета в произвольный момент времени, рис.2.5).

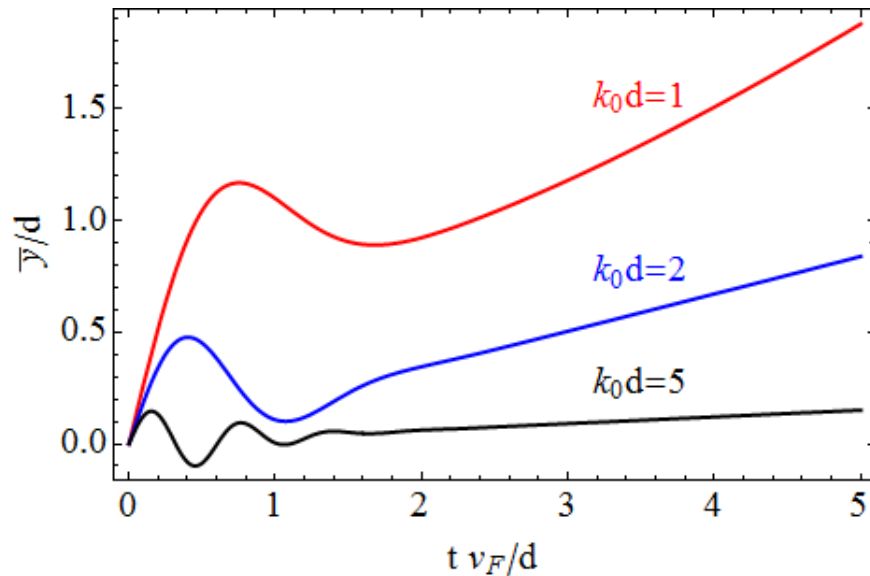


Рисунок 2.8: Среднее значение координаты $\bar{y}(t)$ от времени для гауссовского волнового пакета с начальной поляризацией спина по оси x с $d = 50 \text{ \AA}$, толщина пленки $L = 32 \text{ \AA}$.

Для начальной поляризации волнового пакета вдоль оси y (при этом, естественно, $c_1 = 1$, $c_2 = i$) выражение для среднего значения координаты центра пакета $\bar{y}(t)$ имеет вид:

$$\bar{y}(t) = -\hbar v_F d^2 e^{-k_0^2 d^2} \int_0^\infty e^{-k^2 d^2} \frac{\sin^2(\omega(k)t)}{(\hbar\omega(k))^2} (\Delta I_0(2kk_0d^2) - 2Bk^2 I_2(2kk_0d^2)) k dk. \quad (2.33)$$

Полученный результат качественно отличается от рассмотренного ранее характера осцилляций центра волнового пакета в системе двумерного газа со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, когда для начальной поляризации пакета вдоль оси y ЗВ-осцилляции отсутствовали ($\bar{y}(t) = 0$). Этот результат воспроизводится в выражении (2.33), если положить $\Delta = B = 0$. В случае пленки топологического изолятора ($\Delta \neq 0$, $B \neq 0$) ЗВ-осцилляции центра волновых пакетов с различными значениями начального импульса $\hbar k_0$ приведены на рис.2.9.

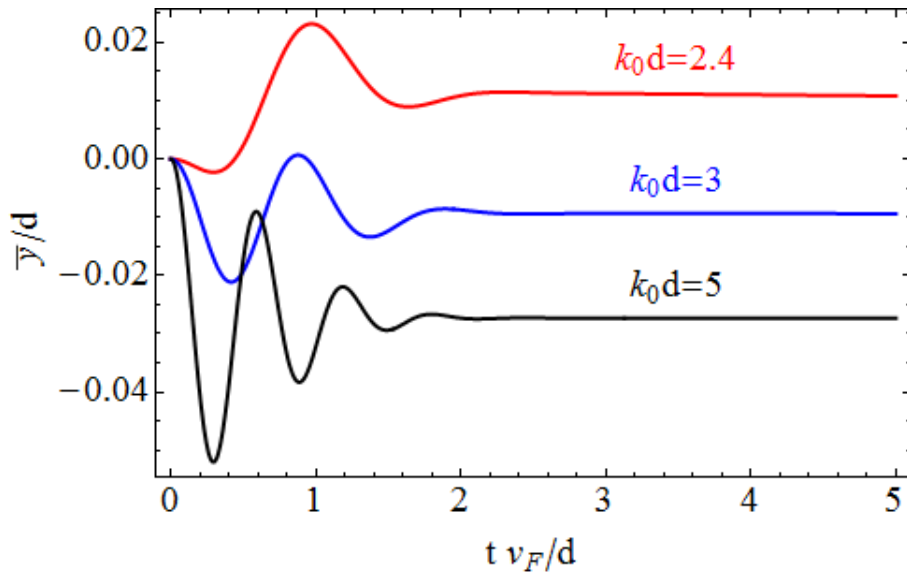


Рисунок 2.9: Среднее значение координаты $\bar{y}(t)$ от времени для гауссовского волнового пакета с начальной поляризацией спина по оси y с $d = 50 \text{ \AA}$, толщина пленки $L = 32 \text{ \AA}$.

Таким образом, характер пространственно-временной эволюции как одномерных, так и двумерных электронных волновых пакетов в тонких пленках топологических изоляторов определяется как размером пакета, так и его пространственно-спиновой симметрией в начальный момент времени. Также начальное спиновое состояние волнового пакета предопределяет особенности высокочастотных осцилляций его центра – *Zitterbewegung*.

Глава 3

Электронные состояния в сверхрешетках со спин-орбитальным взаимодействием и в графене

3.1 Сверхрешетка на основе графена с периодически модулированной дираковской щелью

3.1.1 Дираковская частица в графеновой сверхрешетке

Рассматривается одномерная (1D) сверхрешетка на основе графена с периодически модулированной щелью и относительным смещением зон, характеризующимся некоторым потенциалом V . Такая структура может быть получена нанесением монослойного графена на полосчатую подложку из чередующихся полос оксида кремния и, например, гексагонального нитрида бора h -BN (рис.3.1) [72]. Электронная структура такой сверхрешетки в окрестности К-точки зоны Бриллюэна описывается дираковским гамильтонианом

$$\hat{H} = v_F \hat{p} \hat{\sigma} + V(x) \hat{1} + \Delta(x) \hat{\sigma}_z, \quad (3.1)$$

где \hat{p} – оператор импульса, $\hat{\sigma}_i$ – матрицы Паули, $\hat{1}$ – единичная 2×2 матрица, v_F – скорость ферми, $\Delta(x)$, $V(x)$ – периодические функции, соответствующие Δ и V соответственно для $a \leq x \leq l$ и равные нулю при $0 \leq x < a$. Потенциал V задает смещение центра запрещенной зоны щелевой фракции графена по отношению к дираковской точке в бесщелевом графене [72, 94] (см. рис.3.1). Вообще говоря, скорость Ферми может отличаться для модификаций графена на

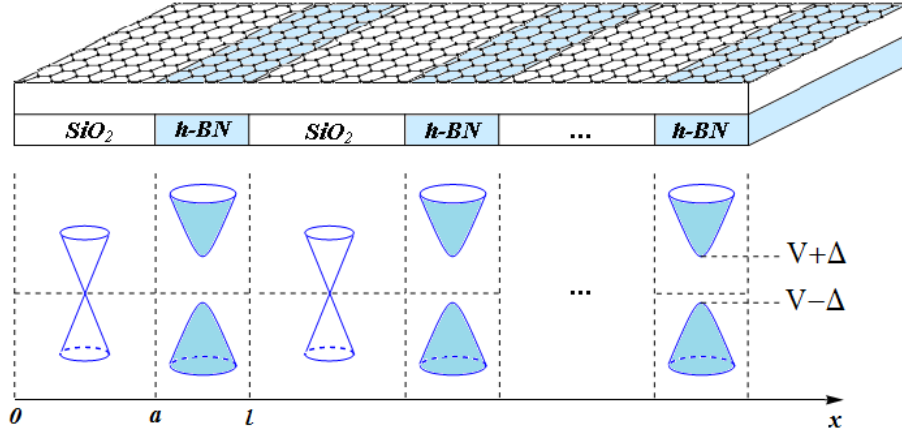


Рисунок 3.1: Вверху: слой графена на полосчатой подложке из оксида кремния и гексагонального нитрида бора. Внизу: схематическая диаграмма, показывающая электронный энергетический спектр графеновой сверхрешетки.

различных подложках. Однако, в нашей модели мы пренебрегаем зависимостью v_F от x , считая $v_F \approx 10^8$ см/с в обеих фракциях графена.

Уравнение Дирака

$$\hat{H}\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (3.2)$$

допускает решение $\Psi(x, y) = \exp(ik_y y)\Psi(x)$, где двухкомпонентная спинорная функция $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению

$$i\frac{d\Psi}{dx} = \hat{h}(x)\Psi(x) \quad (3.3)$$

с матричным оператором

$$\hat{h}(x) = \begin{pmatrix} ik_y & \frac{V(x)-E-\Delta(x)}{\hbar v_F} \\ \frac{V(x)-E+\Delta(x)}{\hbar v_F} & -ik_y \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Формальное решение уравнения (3.3) есть

$$\Psi(x) = \hat{\mathfrak{R}}_x \exp\left(-i \int_{x_0}^x \hat{h}(x_1) dx_1\right) \Psi(x_0), \quad (3.5)$$

где $\hat{\mathfrak{R}}_x$ – оператор упорядочения [71, 95]. Это выражение может быть приведено к виду

$$\Psi(x) = \exp(-i(x - x_0)\hat{h})\Psi(x_0), \quad (3.6)$$

если обе точки x и x_0 принадлежат пространственно-однородной области.

В этом случае удобно ввести матрицу

$$\hat{t}(x - x_0) = \exp(-i(x - x_0)\hat{h}). \quad (3.7)$$

Здесь матрица \hat{h} определена уравнением (3.4), где $V(x) = \Delta(x) = 0$, если $0 \leq x$, $x_0 < a$, и $V(x) = V$, $\Delta(x) = \Delta$, если $a \leq x$, $x_0 \leq l$. Простые вычисления приводят к выражению $\hat{h}^2(x) = K^2(x)\hat{1}$, где $K(x) = \sqrt{((V(x) - E)^2 - \Delta^2(x))/(\hbar v_F)^2 - k_y^2}$. Следовательно, все четные степени в разложении в ряд Тейлора экспоненциальной функции в уравнении (3.7) оказываются пропорциональными единичной матрице, в то время как все нечетные члены разложения пропорциональны матрице \hat{h} . В результате получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} \hat{t}(x - x_0) &= \hat{1} \cos \alpha - i\hat{h}(x) \frac{\sin \alpha}{K(x)} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \alpha + \frac{k_y}{K(x)} \sin \alpha & -i \sin \alpha \frac{V(x) - E - \Delta(x)}{\hbar v_F K(x)} \\ -i \sin \alpha \frac{V(x) - E + \Delta(x)}{\hbar v_F K(x)} & \cos \alpha - \frac{k_y}{K(x)} \sin \alpha \end{pmatrix}, \quad (3.8) \end{aligned}$$

где $\alpha = (x - x_0)K(x)$.

Теперь можем найти, что $\Psi(l) = \hat{T}\Psi(0)$, где $\hat{T} = \hat{t}(l - a)\hat{t}(a)$. Заметим также, что $\det(t) = 1$ и, следовательно, $\det(T) = 1$. Это равенство и условие Блоха $\Psi(l) = \Psi(0) \exp(ikl)$ (здесь k – блоховский волновой вектор) приводят к дисперсионному соотношению $2 \cos(kl) = \text{Tr}(T)$ для одномерной графеновой сверхрешетки. Используя уравнение (3.8), можно найти, что $\text{Tr}(T) = \text{Tr}(t(l - a)t(a))$.

В результате, дисперсионное уравнение записывается в виде

$$\cos(kl) = \cos(k_x a) \cos(q_x(l - a)) + \frac{EV - (\hbar v_F k_x)^2}{(\hbar v_F)^2 k_x q_x} \sin(k_x a) \sin(q_x(l - a)), \quad (3.9)$$

где $k_x \equiv K(+0)$, $q_x \equiv K(l - 0)$. При $(V - E)^2 - \Delta^2 < (\hbar v_F k_y)^2$ волновое число q_x оказывается мнимым, и разрешенные энергии даются выражением (3.9) при замене q_x на $i|q_x|$.

Уравнение (3.9) для разрешенных энергий было получено также Ратниковым в работе [72] путем сшивания волновых функций. Однако, некоторые результаты этой работы в части структуры минизон и существования интерфейсных

состояний оказываются спорными. Ниже приведено подробное обсуждение интерфейсных состояний в данной сверхрешетке. Заметим, что при $\Delta = 0$ уравнение (3.9) переходит в выражение, полученное ранее для монослойного графена в периодическом кусочно-гладком потенциале $V(x)$ [59, 95, 96].

Важно отметить, что описание энергетического спектра сверхрешетки проведено в рамках одноэлектронной картины. Недавние теоретические [97–99] и экспериментальные [100–102] исследования многочастичной проблемы в графене показали, что одним из наиболее важных следствий электрон-электронного взаимодействия может стать перенормирование скорости Ферми. Такая перенормировка, по-видимому, приведет к различным значениям v_F в бесщелевой [99] и щелевой [103] фракциях графена, что, несомненно, несколько изменит основное дисперсионное соотношение (3.9). Тем не менее, до сих пор нет каких-либо строгих количественных оценок перенормировочного эффекта, а экспериментально получаемые значения v_F , как правило, примерно равны 10^8 см/с. Поэтому задача нами решалась в предположении, что различие значений v_F в обеих фракциях графена пренебрежимо мало.

3.1.2 Интерфейсные состояния

Как было показано Ратниковым и Силиным [104], интерфейсные состояния могут существовать в одиночном гетеропереходе на основе графена. Было найдено, что такие состояния появляются в результате пересечения дисперсионных кривых модификаций графена со щелью и без нее. Однако, в сверхрешетке на основе графена формирование интерфейсных минизон считалось невозможным [72]. В отличие от этого утверждения нами установлено, что интерфейсные состояния могут быть реализованы при определенных условиях, обсуждаемых ниже. Так как волновые функции этих состояний ведут себя в зависимости от x экспоненциальным образом, то волновые векторы k_x и q_x должны быть мнимыми. Такими, чтобы

$$(\hbar v_F k_y)^2 > E^2, \quad (\hbar v_F k_y)^2 + \Delta^2 > (E - V)^2. \quad (3.10)$$

В этом случае уравнение (3.9) переписывается в виде

$$\cos(kl) = \cosh(k'_x a) \cosh(q'_x(l - a)) + \frac{EV - E^2 + (\hbar v_F k_y)^2}{(\hbar v_F)^2 k'_x q'_x} \sinh(k'_x a) \sinh(q'_x(l - a)), \quad (3.11)$$

где $k'_x = \sqrt{k_y^2 - \frac{E^2}{(\hbar v_F)^2}}$, $q'_x = \sqrt{k_y^2 + \frac{\Delta^2 - (V - E)^2}{(\hbar v_F)^2}}$.

Очевидно, что решение этого уравнения может существовать лишь в случае, если

$$(\hbar v_F k_y)^2 - E^2 < -EV. \quad (3.12)$$

Так как левая часть этого выражения положительна (см. неравенства (3.10)), то допустимые значения энергии должны быть отрицательными, если $V > 0$, и наоборот. Нетрудно показать, что неравенства (3.10) и (3.12) имеют решения, когда Δ и V отличны от нуля, причем $\Delta > |V|$ и $k_y^2 < \Delta^2(\Delta^2 - V^2)/(\hbar v_F V)^2$ (см. заштрихованную область на рис.3.2).

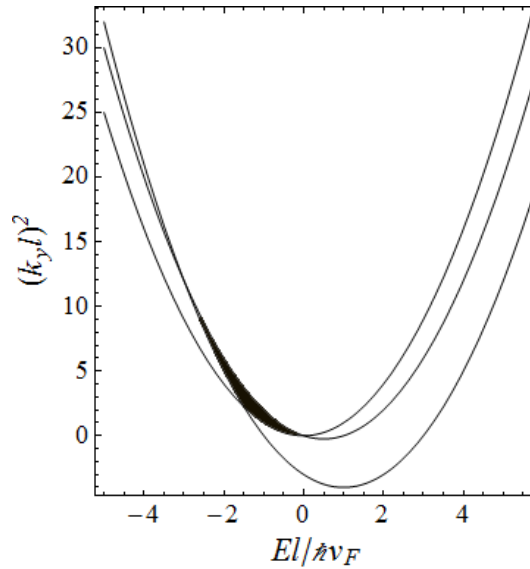


Рисунок 3.2: Графическое решение неравенств (3.10) и (3.12) при $V = 11$ мэВ, $\Delta = 22$ мэВ. Заштрихованная область отвечает интерфейсным состояниям.

В результате, при $V > 0$ интерфейсные состояния могут быть реализованы только в дырочной минизоне, в то время как электронная минизона состоит только из состояний, волновые функции которых осциллируют по крайней мере при $0 < x < a$. На рис.3.3(а) представлена дырочная минизона сверхрешетки для случая $a = l/2 = 30$ нм при $V = 11$ мэВ, $\Delta = 22$ мэВ и $k_y l = 1$. Верхняя

узкая часть валентной минизоны, показанная сплошной линией, сформирована интерфейсными состояниями. Действительно, нетрудно проверить, что любое значение энергии из этой области удовлетворяет неравенствам (3.10) и (3.12) для указанных выше параметров. Пунктирной (красной) линией на рисунке показан интерфейсный энергетический уровень $|E| = \hbar v_F |k_y| (1 - V^2/\Delta^2)^{1/2}$ одиночного гетероперехода [104].

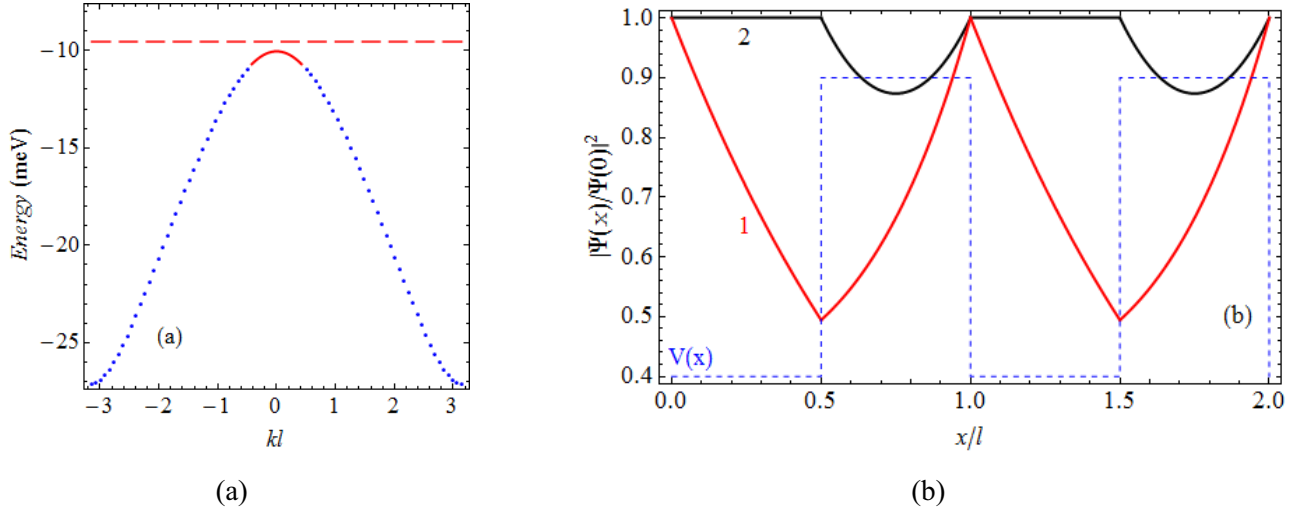


Рисунок 3.3: (а) Дырочная минизона спектра сверхрешетки при $a = l/2 = 30$ нм, $V = 11$ мэВ, $\Delta = 22$ мэВ и $k_y l = 1$. Верхняя часть минизоны, показанная сплошной (красной) линией соответствует интерфейсным состояниям. Пунктирной (красной) линией показан интерфейсный энергетический уровень одиночного гетероперехода; (б) Плотность вероятности для: интерфейсного дырочного состояния (как k'_x , так и q'_x действительные) при $k_y l = 1$, $kl = 0,1$ (кривая 1); осциллирующего дырочного состояния при $k_y l = 0$, $kl = 0,4$ (k'_x является мнимым, q'_x – действительным, кривая 2).

На рис.3.3(б) представлена плотность вероятности интерфейсного состояния (кривая 1) с энергией, принадлежащей верхней части валентной минизоны (сплошная линия на рис.3.3(а)). Видно, что $|\Psi(x)|^2$ экспоненциально спадает по направлению к поверхности $x = a$. Для сравнения на рис.3.3(б) также представлена плотность вероятности для осциллирующего состояния из валентной минизоны (кривая 2). Решая уравнение Дирака при $k_y = 0$ нетрудно показать, что $|\Psi(x)|^2$ всегда постоянна в пределах бесщелевой области (кривая 2). Заметим также, что в этом случае плотность вероятности должна быть симметричной относительно точек $x = a/2$ и $x = (l + a)/2$, как показано на рисунке.

3.2 Влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру полупроводниковых сверхрешеток

В данной главе рассматривается модель композиционной сверхрешетки I типа. Пример такой сверхрешетки – эпитаксиально выращенные периодически чередующиеся тонкие (с толщинами a и b) слои полупроводников с близкими постоянными решетками. При этом электроны оказываются в периодической системе квантовых ям (один полупроводник), разделенных квантовыми барьерами (другой полупроводник), а величина потенциала сверхрешетки есть разность энергетических щелей двух полупроводников Δ . К примеру, для сверхрешетки $GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ величина щели $\Delta \approx 300$ мэВ.

В случае, когда сверхрешетка состоит из слоев кубических полупроводников с решеткой цинковой обманки и минимумом зоны проводимости в Γ -точке, в гамильтониане необходимо учитывать слагаемое, которое ответственно за спин-орбитальное взаимодействие Дрессельхауза \hat{H}_D [28]. Таким образом, электронная структура изучаемой сверхрешетки описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{H}_D + V(z). \quad (3.13)$$

Здесь m – эффективная масса,

$$\hat{H}_D = \gamma \left(\sigma_x \hat{k}_x \left(\hat{k}_y^2 - \hat{k}_z^2 \right) + \sigma_y \hat{k}_y \left(\hat{k}_z^2 - \hat{k}_x^2 \right) + \sigma_z \hat{k}_z \left(\hat{k}_x^2 - \hat{k}_y^2 \right) \right), \quad (3.14)$$

где γ – константа материала, σ_i – матрицы Паули, а $V(z)$ – периодическая функция, определенная на периоде сверхрешетки как

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq z < a, \\ V & \text{при } a \leq z < a + b. \end{cases}$$

Изоэнергетическая поверхность электронов в объемном полупроводнике из-за наличия спин-орбитального взаимодействия расщепляется на две части (рис.3.4(a)). Следует отметить, что, как ясно из явного вида гамильтониана (3.14), в точках $k_x = k_y = k_z$, где спин-орбитальное взаимодействие Дрессельхауза равно нулю, вырождение по спину не снимается, и две изоэнергетические поверхности касаются друг друга в восьми точках. Эти точки отмечены на рис.3.4(a). Периодический потенциал сверхрешетки, как будет показано ни-

же, полностью снимает вырождение по спину. Одна из таких точек на рис.3.4(b) отмечена стрелкой.

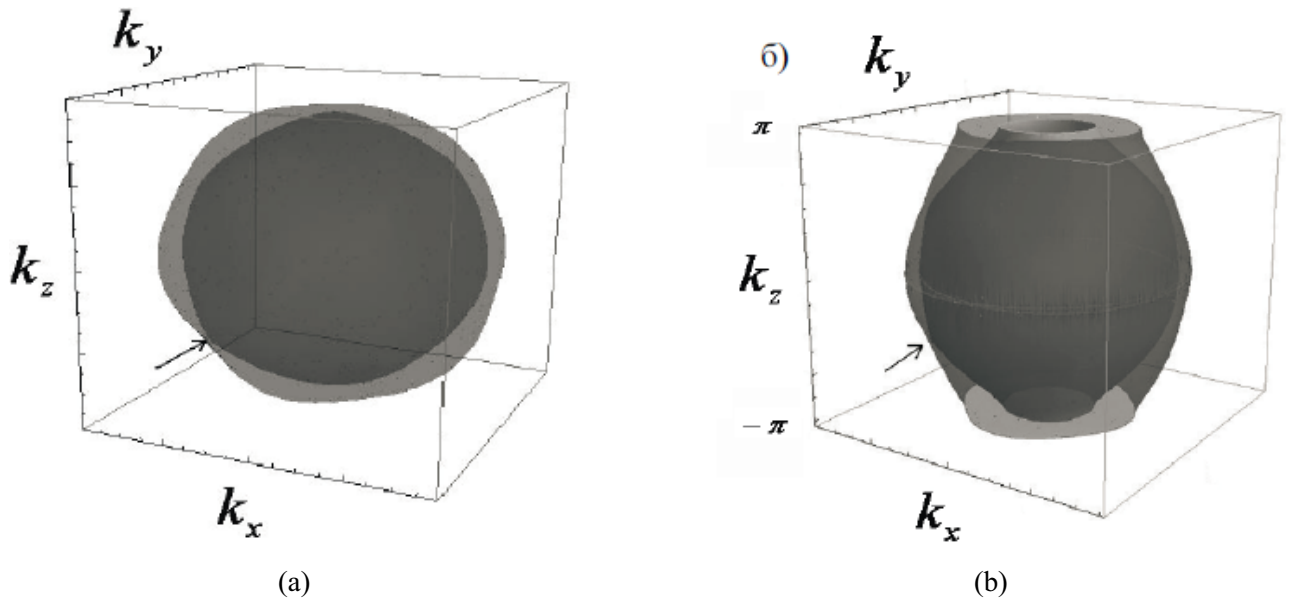


Рисунок 3.4: Пример изоэнергетической поверхности для электронов в \mathbf{k} -пространстве при наличии спин-орбитального взаимодействия Дрессельхауза: (a) для полупроводника; (b) для полупроводниковой сверхрешетки. По осям отложены безразмерные компоненты волнового вектора $\tilde{k}_i = k_i(a + b)$ ($a + b$ – период сверхрешетки).

Энергетическая структура сверхрешетки изображена на рис.3.5. Константы спин-орбитального взаимодействия в первой (γ_1) и второй (γ_2) областях различны. Примером такой структуры может служить соединение $GaSb/InSb$ в силу как небольшого различия постоянных решётки его составляющих, так и достаточно больших значений констант спин-орбитального взаимодействия: $\gamma_{GaSb} = 187 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$, $\gamma_{InSb} = 220 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$ [105, 106].

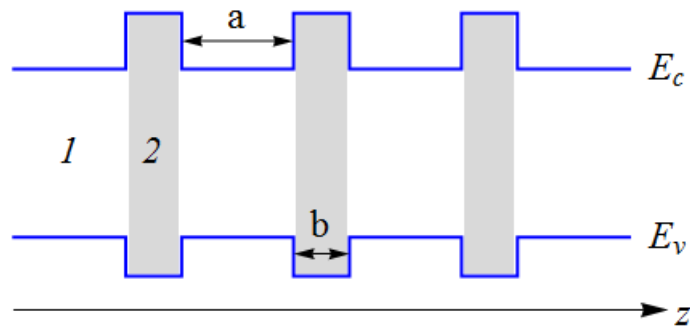


Рисунок 3.5: Энергетическая структура композиционной сверхрешетки I типа.

В случае ориентации сверхрешетки вдоль оси z гамильтониан (3.14) удобно записать в цилиндрической системе координат:

$$\hat{H}_D = \gamma k_{\parallel} \left(\begin{pmatrix} 0 & e^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - ik_{\parallel} \cos(2\varphi) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{ik_{\parallel}^2}{2} \sin(2\varphi) \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ -e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \right), \quad (3.15)$$

где $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$, φ – полярный угол в плоскости (k_x, k_y) .

Собственные функции гамильтониана (3.13) будем искать в виде

$$\Psi(\rho, z) = C e^{ik_{\parallel}\rho} \begin{pmatrix} a(z) \\ b(z) \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

где $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ – полярный радиус. Компоненты спинора $a(z)$, $b(z)$ можно найти, подставив (3.16) в полный гамильтониан (3.13) с учетом спин-орбитального взаимодействия Дрессельхауза (3.15). В результате такой подстановки получается система из двух однородных дифференциальных уравнений второго порядка с постоянными коэффициентами, решением которой в каждой области является суперпозиция четырёх спиноров вида

$$\Psi(z) = \sum_{j=1}^4 a_j \begin{pmatrix} 1 \\ b_j \end{pmatrix} e^{i\lambda_j z}. \quad (3.17)$$

Возможные значения λ_j в (3.17) находятся, как обычно, из условия обращения в нуль определителя

$$\begin{vmatrix} -\tilde{\lambda}^2 - \tilde{\lambda}\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}^2 \cos 2\varphi + \pi^2(\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) - \tilde{k}_{\parallel}^2 & \tilde{\lambda}^2\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}e^{i\varphi} - \frac{i\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}^3 \sin 2\varphi e^{-i\varphi}}{2} \\ \tilde{\lambda}^2\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}e^{-i\varphi} + \frac{i\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}^3 \sin 2\varphi e^{i\varphi}}{2} & -\tilde{\lambda}^2 + \tilde{\lambda}\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}^2 \cos 2\varphi + \pi^2(\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) - \tilde{k}_{\parallel}^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (3.18)$$

а нижняя j -я компонента спинора в (3.17) есть

$$b_j = \frac{\tilde{\lambda}_j^2 + \tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}^2 \cos(2\varphi)\tilde{\lambda}_j - \pi^2(\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) + \tilde{k}_{\parallel}^2}{\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel}e^{i\varphi} \left(\tilde{\lambda}_j^2 - i\tilde{k}_{\parallel}^2 \sin \varphi \cos \varphi e^{-2i\varphi} \right)}, \quad (3.19)$$

где $\tilde{\gamma} = 2m\gamma/\hbar^2(a+b)$, $\tilde{v}_0 = 2mV(a+b)^2/\pi^2\hbar^2$, $\tilde{\varepsilon} = 2m\varepsilon(a+b)^2/\pi^2\hbar^2$, $\tilde{k}_{\parallel} = k_{\parallel}(a+b)$ – безразмерные константа спин-орбитального взаимодействия Дрессельхауза, высота барьера, энергия и компонента волнового вектора в плоскости (k_x, k_y) соответственно, $\tilde{\lambda} = \lambda(a+b)$.

Корни биквадратного уравнения, к которому сводится равенство (3.18), записываются в виде:

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}^2 = & (2(1 - (\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel})^2))^{-1} \left(2(\pi^2(\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) - \tilde{k}_{\parallel}^2) + \tilde{\gamma}^2\tilde{k}_{\parallel}^4 \cos 4\varphi \pm \right. \\ & \left. \pm \tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel} \sqrt{(2(\pi^2(\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) - \tilde{k}_{\parallel}^2) + \tilde{k}_{\parallel}^2 \cos 4\varphi)^2 + (1 - (\tilde{\gamma}\tilde{k}_{\parallel})^2)(\sin^2 2\varphi - \cos^2 4\varphi)\tilde{k}_{\parallel}^4} \right). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Найденные таким образом на периоде сверхрешетки волновые функции должны удовлетворять условиям «сшивки» на границе полупроводников. Эти условия представляют собой, во-первых, непрерывность волновой функции и, во-вторых, непрерывность тока

$$\hat{v}_z \begin{pmatrix} a(z) \\ b(z) \end{pmatrix} \Big|_{a-0}^{a+0} = 0, \quad \hat{v}_z \begin{pmatrix} a(z) \\ b(z) \end{pmatrix} \Big|_{(a+b)-0}^{(a+b)+0} = 0, \quad (3.21)$$

где $\hat{v}_z = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, z]$ – оператор скорости, который в нашем случае имеет вид

$$\hat{v}_z = \begin{pmatrix} -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\gamma k_{\parallel}^2 \cos(2\varphi)}{\hbar} & \frac{2i\gamma k_{\parallel} e^{i\varphi}}{\hbar} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{2i\gamma k_{\parallel} e^{-i\varphi}}{\hbar} \frac{\partial}{\partial z} & -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\gamma k_{\parallel}^2 \cos(2\varphi)}{\hbar} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Ещё одно условие, которому должны удовлетворять найденные функции (3.17) – условие теоремы Блоха, а именно: $\Psi(z) = \Psi(z - (a+b))e^{iK(a+b)}$, где K – квазиимпульс, $a+b$ – период сверхрешетки.

Таким образом, для определения восьми коэффициентов a_j мы имеем однородную систему из восьми линейных уравнений. Условие существования нетривиального решения этой системы – равенство нулю её детерминанта – позволяет получить зонный спектр сверхрешетки со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза. При этом явный вид дисперсионного уравнения оказывается весьма громоздким. Поэтому для анализа зонной структуры сверхрешетки

сначала рассмотрим частный случай, когда $|k_x| = |k_y|$, то есть с $\varphi = \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}$. В этом случае гамильтониан спин-орбитального взаимодействия (3.15) в силу возникшей симметрии в плоскости (k_x, k_y) принципиально упрощается: исчезает слагаемое, пропорциональное $\frac{\partial}{\partial z}$, и матрица гамильтониана диагоналізується волновыми функциями $\Psi_{\pm, k_{\parallel}}(z, \rho) = e^{ik_{\parallel}\rho} \chi_{\pm} u_{\pm, k_{\parallel}}(z)$ [107], [108], где $\chi_{\pm} = (1, \mp e^{-i\varphi})^T / \sqrt{2}$, а скалярные функции $u_{\pm, k_{\parallel}}(z)$ в областях (1) и (2) имеют вид:

$$u_{\pm, k_{\parallel}}(z) = \left(A_{1,2}^{\pm} e^{i\lambda_{1,2}^{\pm} z} + B_{1,2}^{\pm} e^{-i\lambda_{1,2}^{\pm} z} \right) \chi_{\pm}, \quad (3.23)$$

$$\lambda_1^{\pm}(a+b) = \sqrt{\frac{\pi^2 \tilde{\varepsilon} - \tilde{k}_{\parallel}^2 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{\parallel}^3 / 2}{1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{\parallel}}},$$

$$\lambda_2^{\pm}(a+b) = \sqrt{\frac{\pi^2 (\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) / \xi - \tilde{k}_{\parallel}^2 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{\parallel}^3 / 2}{1 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{\parallel}}},$$

$$\xi = m_1 / m_2. \quad (3.24)$$

Таким образом, в данном случае зонный спектр представляет собой две серии минизон, определяемых дисперсионным соотношением:

$$\cos K(a+b) = \cos \lambda_1^{\pm} a \cos \lambda_2^{\pm} b - \frac{(P_1^{\pm} \lambda_1^{\pm})^2 + (P_2^{\pm} \lambda_2^{\pm})^2}{2P_1^{\pm} P_2^{\pm} \lambda_1^{\pm} \lambda_2^{\pm}} \sin \lambda_1^{\pm} a \sin \lambda_2^{\pm} b, \quad (3.25)$$

где $P_{1,2}^{\pm} = -\frac{i\hbar}{m_{1,2}} \left(1 \pm \frac{2m_{1,2}\gamma_{1,2}k_{\parallel}}{\hbar^2} \right)$.

При этом состояния каждой серии (соответствующие индексам «+» и «-»), являющиеся решением уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \gamma k_{\parallel} \frac{\sqrt{2}}{2} (\sigma_x - \sigma_y) \left(\frac{k_{\parallel}^2}{2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z), \quad (3.26)$$

имеют, очевидно, следующие спиновые плотности: $S_z^{\pm}(z) = 0$, $S_x^{\pm}(z) = -S_y^{\pm}(z)$.

Численный анализ дисперсионного уравнения (3.25) показывает, что ширина минизон, а также величина запрещенных зон существенно зависят от типа спиновой поляризации («+» и «-»). Так, с ростом параметра k_{\parallel} минизоны из серии с поляризацией «+» оказываются заметно уже аналогичных минизон из серии с поляризацией «-». При этом обе серии минизон смещаются вверх по энергии.

Аналитический анализ дисперсионного уравнения (3.25) позволяет установить значения энергий (и, соответственно, продольного волнового вектора $k_{||}$), при которых пара соседних минизон касается друг друга в центре зоны Бриллюэна ($K = 0$) – при этом энергетическая щель между ними становится равной нулю. Так, при $a = b$ волновые векторы совпадают $\lambda_1^\pm = \lambda_2^\pm = \lambda^\pm(\tilde{\varepsilon}_0^\pm)$, когда

$$\tilde{\varepsilon}_0^\pm = \frac{\pm \frac{3}{2} \left(\frac{\tilde{k}_{||}}{\pi} \right)^2 (\tilde{\gamma}_2 - \tilde{\gamma}_1) \xi - V(1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{||})}{(\xi - 1) \pm \tilde{k}_{||} (\xi \tilde{\gamma}_2 - \tilde{\gamma}_1)}, \quad (3.27)$$

а дисперсионное уравнение упрощается

$$1 = \cos^2 \frac{\lambda^\pm}{2} - \frac{(P_1^\pm)^2 + (P_2^\pm)^2}{2P_1^\pm P_2^\pm} \sin^2 \frac{\lambda^\pm}{2} \quad (3.28)$$

и, очевидно, имеет решение $\frac{\lambda^\pm}{2}(\tilde{\varepsilon}_0^\pm) = \pi n$ с $n = 1, 2, \dots$

В простейшем случае, когда $\xi = 1$ и $V = 0$, щель между двумя соседними минизонами пропадает, независимо от типа спиновой поляризации, при значениях параметра $\tilde{k}_{||}^0 = 2\sqrt{2}\pi n$ (и соответствующим энергиям, равным $\tilde{\varepsilon}_0 = 12n^2$), рис.3.6(a). При этом закон дисперсии $\varepsilon(K)$ в окрестности точки касания ($K = 0$) оказывается линейным, а наклон прямых зависит от типа спиновой поляризации:

$$\tilde{\varepsilon}(\tilde{q}) \approx \tilde{\varepsilon}_0 \pm \frac{8}{\pi} \frac{(1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{||}^0)(1 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{||}^0)}{\sqrt{(1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{||}^0)^2 + (1 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{||}^0)^2}} \tilde{q}, \quad (3.29)$$

где $\tilde{q} = q(a + b)$ – малое отклонение от центра зоны Бриллюэна. Таким образом, в окрестности точки касания двух минизон групповая скорость $v_q = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial q}$ также зависит от типа спиновой поляризации и оказывается равной

$$v_q^\pm = \pm \frac{8}{\pi} \frac{(1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{||}^0)(1 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{||}^0)}{\sqrt{(1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{||}^0)^2 + (1 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{||}^0)^2}} \quad (3.30)$$

(в единицах $\frac{\pi^2 \hbar}{2m_1(a+b)}$).

В общем случае, когда $\xi \neq 1$, $V \neq 0$, значение волнового вектора $k_{||}$, при котором происходит касание пары минизон, соответствующих определенной спиновой поляризации, необходимо находить численно. При этом щель между па-

рой минизон с другой спиновой поляризацией оказывается отличной от нуля, рис.3.6(b), 3.6(c).

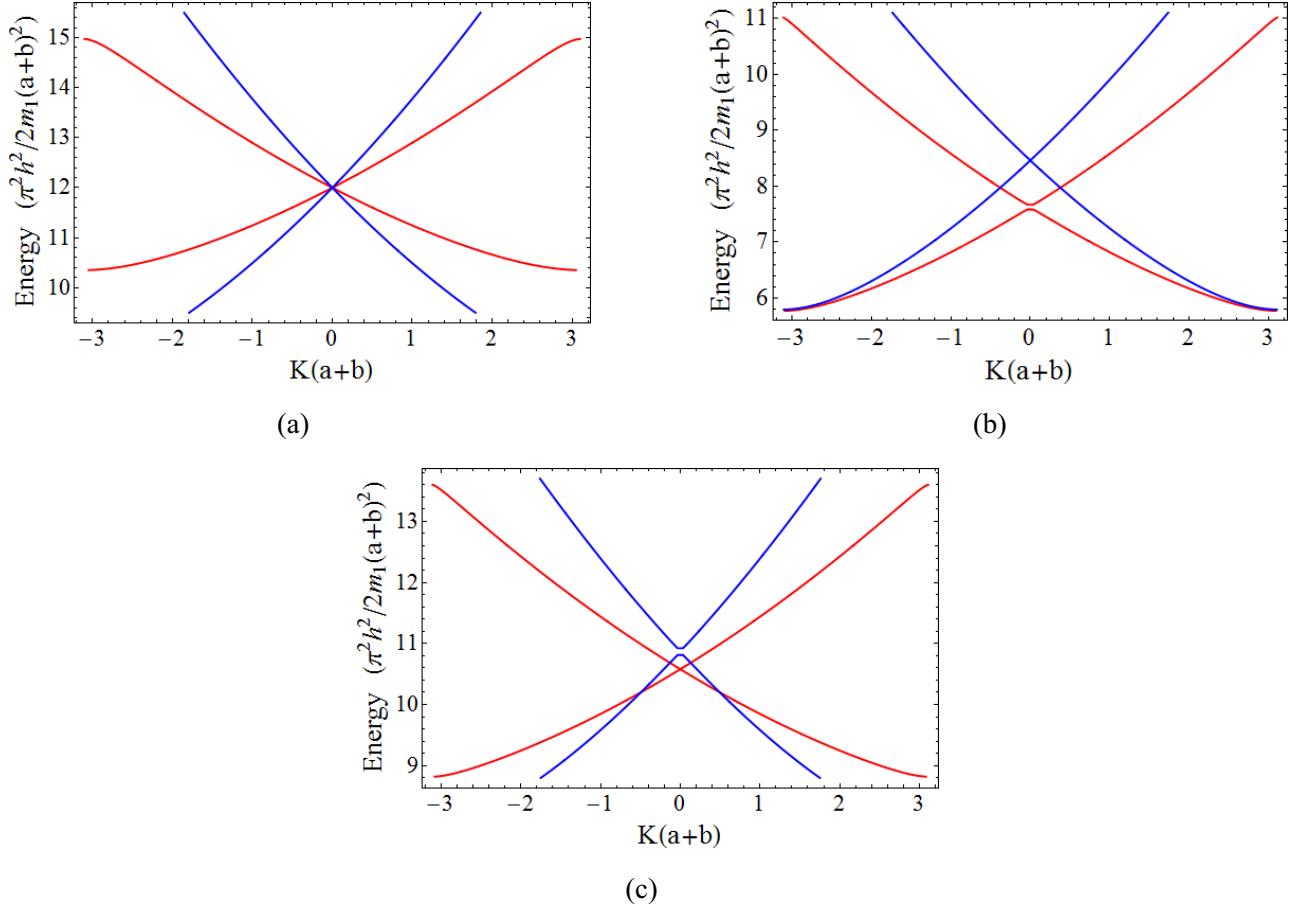


Рисунок 3.6: Касание минизон в полупроводниковой сверхрешетке с модельными параметрами $\tilde{\gamma}_1 = 0,05, \tilde{\gamma}_2 = 0,02, a = b$: (a) $\tilde{v}_0 = 0, \xi = 1, n = 1$ ($\tilde{k}_{\parallel} = 2\sqrt{2}\pi$); (b) $\tilde{v}_0 = 2, \xi = 0,8, \tilde{k}_{\parallel} \approx 6,14$; (c) $\tilde{v}_0 = 2, \xi = 0,8, \tilde{k}_{\parallel} \approx 8,21$. Красным цветом показаны минизоны, соответствующие спиновой поляризации «-», синим – «+».

Для случая $|k_x| \neq |k_y|$ вычисления энергетического спектра проводились численно. Так, на рис.3.7 представлен расчет энергии пары минизон (расщепившихся каждая на две вследствие спин-орбитального взаимодействия) при $K = 0$ как функции угла φ для тех же модельных параметров, что на рис.3.6(a). Видно, что энергия минизон сильно зависит от соотношения между волновыми векторами k_x и k_y ($\text{tg } \varphi = k_y/k_x$).

Также по найденным численно волновым функциям (3.17) нетрудно вычислить плотность вероятности, а также спиновые поляризации электронов в сверх-

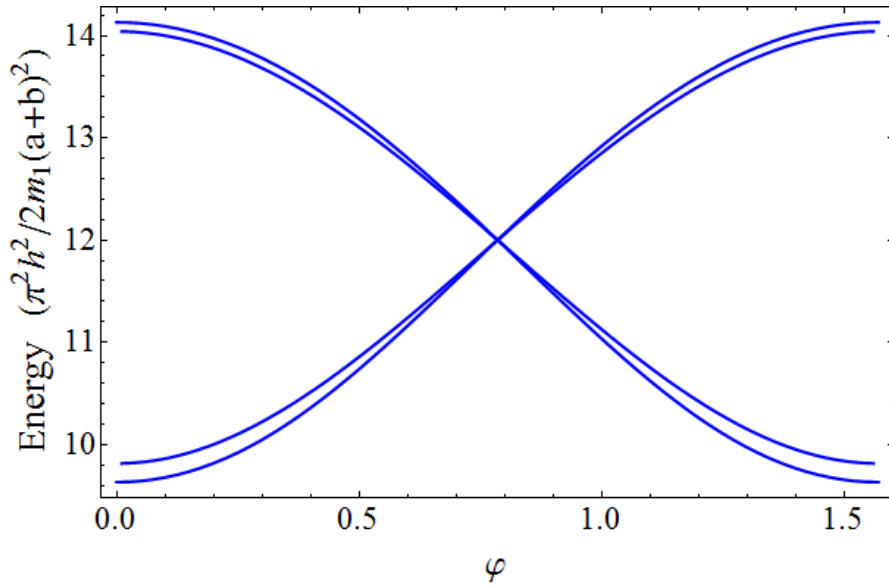


Рисунок 3.7: Энергетический спектр полупроводниковой сверхрешетки как функция угла φ (при $K = 0$) для тех же модельных параметров, что на рис.3.6(a), $\tilde{k}_{\parallel} = 2\sqrt{2}\pi$. Представлена пара минизон, расщепленная спин-орбитальным взаимодействием.

решетке по стандартным формулам:

$$S_i(z) = \Psi^\dagger(z) \hat{\sigma}_i \Psi(z). \quad (3.31)$$

В качестве примера на рис.3.8 и рис.3.9 приведены результаты вычислений для первой минизоны сверхрешётки с параметрами $\tilde{v}_0 = 1$, $\tilde{k}_{\parallel} = 10$, $\varphi = 0$, $\tilde{a} = a/(a+b) = 0,9$, $\tilde{\gamma}_1 = 33,4 \cdot 10^{-4}$, $\tilde{\gamma}_2 = 12,5 \cdot 10^{-4}$, $\xi = m_1/m_2 = 3,15$. Заметим, что величина спин-орбитального расщепления этой минизоны на две подзоны $\Delta\varepsilon \approx 0,1 \cdot \varepsilon_0 = 1,23 \cdot 10^{-22}$ Дж, что соответствует разнице по частоте $\Delta\nu \approx 0,2$ ТГц. Геометрия изоэнергетической поверхности с учётом периодического потенциала сверхрешетки представлена на рис.3.4(b).

Для исследования вопроса о существовании интерфейсных состояний (при $|k_x| = |k_y|$) необходимо найти область значений параметров сверхрешетки, при которых волновые векторы $\lambda_{1,2}^\pm$ в (3.24) оказываются мнимыми, то есть

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\pi^2 \tilde{\varepsilon} - \tilde{k}_{\parallel}^2 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{\parallel}^3 / 2}{1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_{\parallel}} < 0, \\ \frac{\pi^2 (\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) / \xi - \tilde{k}_{\parallel}^2 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{\parallel}^3 / 2}{1 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_{\parallel}} < 0. \end{array} \right. \quad (3.32)$$

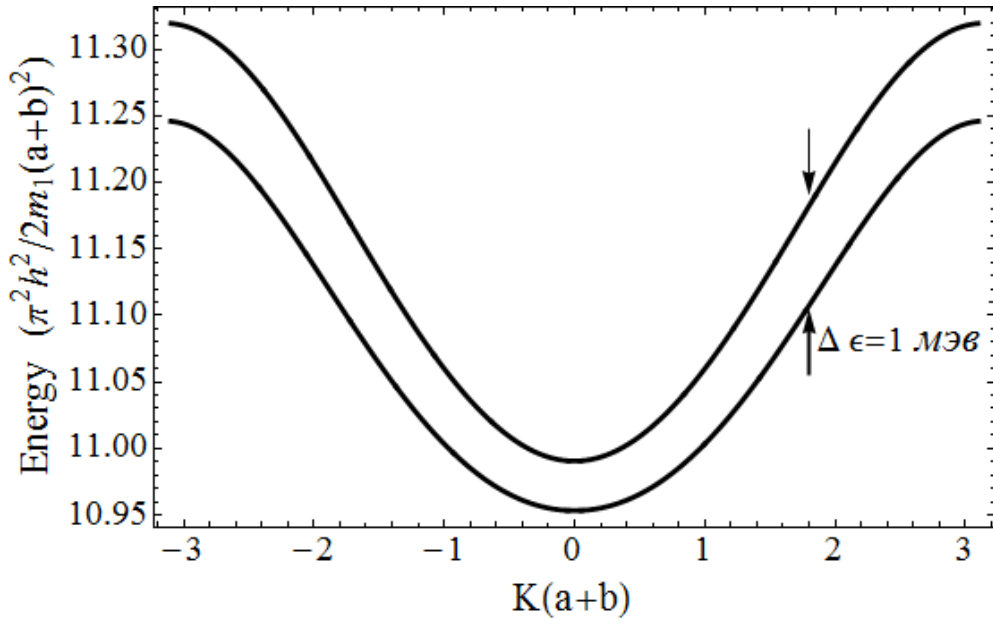


Рисунок 3.8: Первая расщепившаяся спин-орбитальным взаимодействием мини-зона сверхрешётки *GaSb/InSb*. Параметры структуры указаны в тексте.

При этом дисперсионное уравнение (3.25) переписывается в виде

$$\cos K(a+b) = \cosh \kappa_1^\pm a \cosh \kappa_2^\pm b + \frac{(P_1^\pm \kappa_1^\pm)^2 + (P_2^\pm \kappa_2^\pm)^2}{2P_1^\pm P_2^\pm \kappa_1^\pm \kappa_2^\pm} \sinh \kappa_1^\pm a \sinh \kappa_2^\pm b \quad (3.33)$$

с действительными волновыми векторами

$$\begin{aligned} \kappa_1^\pm(a+b) &= \sqrt{\frac{-\pi^2 \tilde{\varepsilon} + \tilde{k}_\parallel^2 \mp \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_\parallel^3 / 2}{1 \pm \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_\parallel}}, \\ \kappa_2^\pm(a+b) &= \sqrt{\frac{-\pi^2 (\tilde{\varepsilon} - \tilde{v}_0) / \xi + \tilde{k}_\parallel^2 \mp \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_\parallel^3 / 2}{1 \pm \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_\parallel}}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Левая часть дисперсионного уравнения (3.33) по модулю не превышает единицу, поэтому это уравнение может иметь решения лишь в том случае, когда множитель при втором слагаемом в его правой части будет отрицательным:

$$\frac{(P_1^\pm \kappa_1^\pm)^2 + (P_2^\pm \kappa_2^\pm)^2}{2P_1^\pm P_2^\pm \kappa_1^\pm \kappa_2^\pm} < 0, \quad (3.35)$$

что равносильно совокупности двух систем

$$\begin{cases} \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_\parallel < 1, \\ \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_\parallel > 1, \end{cases} \quad \begin{cases} \tilde{\gamma}_1 \tilde{k}_\parallel > 1, \\ \tilde{\gamma}_2 \tilde{k}_\parallel < 1. \end{cases} \quad (3.36)$$

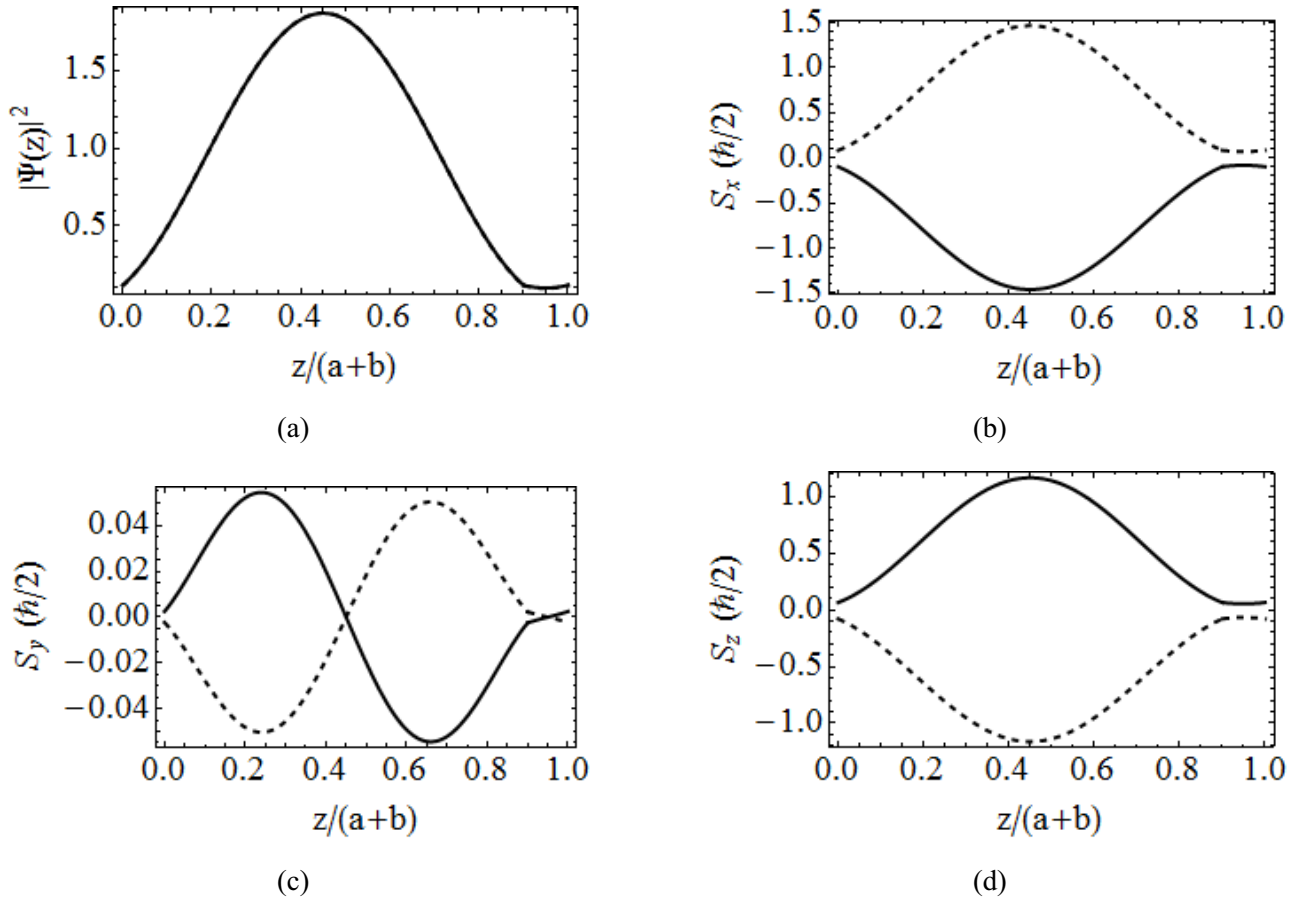


Рисунок 3.9: Блоховские спиноры и спиновые плотности в $GaSb/InSb$ -сверхрешётке при $K(a+b) = 1$: (a) электронная плотность $|\Psi(z)|^2$; спиновые плотности (b) $\bar{s}_x(z)$; (c) $\bar{s}_y(z)$; (d) $\bar{s}_z(z)$. Параметры структуры те же, что на рис.3.8. Сплошная линия отвечает верхней ветви минизоны, пунктирная – нижней. Электронная плотность для обеих ветвей одинаковая.

Нетрудно показать, что условия (3.32) и (3.36) не выполняются одновременно ни при каких возможных значениях параметров сверхрешетки. Таким образом, в случае, когда $|k_x| = |k_y|$, интерфейсные состояния в исследуемой сверхрешетке отсутствуют. Заметим, что в отличие от результатов работы [109], в которой обнаружены интерфейсные состояния на границе между областями двумерного газа с различным механизмом спин-орбитального взаимодействия (Рашбы и Дресельхауза), а также между областями со спин-орбитальным взаимодействием и без него, на интерфейсе между двумя полупроводниками со спин-орбитальным взаимодействием (3.14) (когда $|k_x| = |k_y|$) приграничные состояния отсутствуют.

В заключение следует отметить, что в самом общем случае n неоднородностей на периоде сверхрешетки расчет зонного спектра сводится к исследованию

на наличие нетривиальных решений однородной системы из $4n$ линейных алгебраических уравнений, что принципиально не меняет схему расчета.

Спин-орбитальное взаимодействие, таким образом, расщепляет каждую зону сверхрешетки на две подзоны, снимая тем самым вырождение по спину. Это, в свою очередь, должно сказаться на характере блоховских осцилляций в рассмотренных сверхрешетках, привести к изменению характеристик каскадных лазеров, излучающих в терагерцевом диапазоне [110], и т.д.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем:

- Проведено всестороннее исследование эффектов коллапса и возрождения, а также явления *Zitterbewegung* релятивистских волновых пакетов и волновых пакетов в графене в присутствии внешнего магнитного поля. Аналитически и численно рассчитаны плотности вероятности, а также спиновые плотности волновых пакетов. Показано, что пакеты, содержащие состояния с положительными и отрицательными энергиями, распадаются на два подпакета, которые вращаются по циклотронным орбитам в противоположных направлениях. Следствием их интерференции являются высокочастотные осцилляции с $\omega \sim 10^{21} \text{ с}^{-1}$ для релятивистского волнового пакета и $\sim 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – для пакета в графене.
- Впервые исследованы особенности пространственно-временной эволюции волновых пакетов, сформированных на поверхности 3D топологических изоляторов типа Bi_2Se_3 , а также тонких пленок. Обнаружена зависимость характера дрожания центра волнового пакета от его начальной пространственно-спиновой симметрии, а также от параметров гамильтониана (толщины пленки топологического изолятора, величины энергетической щели и т.д.).
- Показано, что баллистическим кондактансом квантовой проволоки со спин-орбитальным взаимодействием можно управлять с помощью внешнего электрода: изменяя напряжение на нем, удастся эффективно модифицировать электронный энергетический спектр, в результате чего должны наблюдаться дополнительные пики проводимости канала.
- Впервые установлено, что в сверхрешетке на основе графена с периодически модулированной дираковской щелью возможно существование

неосциллирующих (интерфейсных) состояний. Найдена область параметров сверхрешетки, при которых эти состояния должны реализовываться.

- В сверхрешетках, созданных на основе полупроводников со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза, построены изоэнергетические поверхности, найдена величина расщепления минизон, равная ~ 1 мэВ, что соответствует терагерцевому диапазону излучения.

Автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю – профессору *Демиховскому Валерию Яковлевичу* – за неоценимую помощь в постановке и решении задач, а также за доскональное и продуктивное обсуждение полученных научных результатов. Также автор безмерно признателен доценту кафедры теоретической физики *Максимовой Галине Михайловне* за регулярные консультации в области аналитических вычислений и обсуждение отдельных вопросов диссертационной работы.

Список публикаций автора по теме диссертации

- A1. Demikhovskii, V. Ya. Long-term cyclotron dynamics of relativistic wave packets: Spontaneous collapse and revival / V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, A. A. Perov et al. // Phys. Rev. A. — 2012. — Vol. 85. — P. 022105.
- A2. Демиховский, В. Я. Мезоскопические состояния в графене, находящемся в магнитном поле: коллапс и возрождение волновых пакетов / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Физика низких температур. — 2013. — Т. 39. — С. 26.
- A3. Демиховский, В. Я. Управление кондактансом квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Известия РАН. Серия физическая. — 2009. — Т. 73, № 7. — С. 975 (Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. — 2009. — Vol. 73, № 7. — P. 919).
- A4. Демиховский, В. Я. *Zitterbewegung* волновых пакетов и кондактанс квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2010. — № 5. — С. 69 (Journal of Surface Investigation. Xray, Synchrotron and Neutron Techniques. — 2010. — Vol. 4. — P. 423).
- A5. Демиховский, В. Я. Динамика электронных волновых пакетов в топологических изоляторах / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Письма в ЖЭТФ. — 2014. — Т. 99. — С. 110.

- A6. Maksimova, G. M. Graphene superlattice with periodically modulated Dirac gap / G. M. Maksimova, E. S. Azarova, A., V. Telezhnikov et al. // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 86. — P. 205422.
- A7. Тележников, А. В. Влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру полупроводниковых сверхрешеток / А. В. Тележников, В. Я. Демиховский // Вестник ННГУ. — 2010. — № 5(2). — С. 32.
- A8. Тележников, А. В. Управление кондактансом квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия / А. В. Тележников, В. Я. Демиховский // Наноп физика и наноэлектроника: Труды XIII международного симпозиума. — Н.Новгород: ИФМ РАН, 2009. — С. 513.
- A9. Тележников, А. В. Зонный спектр мультислойных гетероструктур (сверхрешеток) со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза / А. В. Тележников, В. Я. Демиховский // Наноп физика и наноэлектроника: Труды XIV международного симпозиума. — Н.Новгород: ИФМ РАН, 2010. — С. 515.
- A10. Тележников, А. В. Динамика волновых пакетов в графене, находящемся в магнитном поле / А. В. Тележников, Е. В. Фролова, В. Я. Демиховский // Наноп физика и наноэлектроника: Труды XV международного симпозиума. — Н.Новгород: ИФМ РАН, 2011. — С. 397.
- A11. Тележников, А. В. Мезоскопические состояния в графене, находящемся в магнитном поле: коллапс и возрождение волновых пакетов / А. В. Тележников, В. Я. Демиховский // Наноп физика и наноэлектроника: Труды XVI международного симпозиума. — Н.Новгород: ИФМ РАН, 2012. — С. 400.
- A12. Фролова, Е. В. Пространственно-временная эволюция квантовых состояний в двухслойном графене / Е. В. Фролова, А. В. Тележников, Н. А. Кравец // Наноп физика и наноэлектроника: Труды XVI международного симпозиума. — Н.Новгород: ИФМ РАН, 2012. — С. 413.
- A13. Максимова, Г. М. Сверхрешетка на основе графена с периодически модулированной дираковской щелью / Г. М. Максимова, Е. С. Азарова,

- А. В. Тележников, В. А. Бурдов // Нанofизика и наноэлектроника: Труды XVII международного симпозиума. — Н.Новгород: ИФМ РАН, 2013. — С. 604.
- A14. Демиховский, В. Я. Динамика электронных волновых пакетов в 3D топологических изоляторах / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Нанofизика и наноэлектроника: Труды XVIII международного симпозиума. — Н.Новгород: ИФМ РАН, 2014. — С. 99.
- A15. Демиховский, В. Я. Управление кондактансом квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Физика низкоразмерных систем и поверхностей: Труды первого международного междисциплинарного симпозиума. — Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2008. — С. 300.
- A16. Демиховский, В. Я. Спиновая поляризация и *Zitterbewegung* в каналах со спин-орбитальным взаимодействием / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Среды со структурным и магнитным упорядочением: Труды второго международного симпозиума. — Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2009. — С. 145.
- A17. Демиховский, В. Я. Состояния типа «шредингеровский кот» в полупроводниках и низкоразмерных полупроводниковых структурах / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // Среды со структурным и магнитным упорядочением (Multiferroics-3): Труды третьего международного симпозиума. — Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2011. — С. 44.
- A18. Тележников, А. В. Коллапс и возрождение локализованных волновых пакетов в монослойном графене во внешнем магнитном поле / А. В. Тележников // Физика низкоразмерных систем и поверхностей: Труды третьего международного междисциплинарного симпозиума. — Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2012. — С. 107.
- A19. Максимова, Г. М. Графеновая сверхрешетка с периодически модулированной щелью / Г. М. Максимова, В. А. Бурдов, Е. С. Азарова, А. В. Тележников // Среды со структурным и магнитным упорядочением (Multiferroics-4): Труды четвертого международного междисциплинарного симпозиума. — Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2013. — С. 92.

- A20. Демиховский, В. Я. Эволюция квантовых локализованных состояний и *zitterbewegung* в тонкой пленке 3D топологического изолятора Bi_2Se_3 / В. Я. Демиховский, А. А. Перов, А. В. Тележников // Физика низкоразмерных систем и поверхностей: Труды четвертого международного междисциплинарного симпозиума. — Ростов-на-Дону: МАРТ, 2014. — С. 31.
- A21. Тележников, А. В. Управление кондактансом квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия / А. В. Тележников, В. Я. Демиховский // Микро-, нанотехнологии и их применение: Тезисы докладов 3-ей всероссийской школы молодых ученых. — Черноголовка: ИПТМ РАН, 2008. — С. 43.
- A22. Тележников, А. В. Электронные квантовые состояния в сверхрешетках со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза / А. В. Тележников, В. Я. Демиховский // Микро-, нанотехнологии и их применение: Тезисы докладов 4-ей всероссийской конференции молодых ученых. — Черноголовка: ИПТМ РАН, 2010. — С. 76.
- A23. Тележников, А. В. Электронная структура графеновой сверхрешетки с периодически модулированной дираковской щелью / А. В. Тележников, Г. М. Максимова, В. А. Бурдов, Е. С. Азарова // Микро-, нанотехнологии и их применение: Тезисы докладов 5-ей всероссийской конференции молодых ученых. — Черноголовка: ИПТМ РАН, 2012. — С. 66.
- A24. Демиховский, В. Я. Зонный спектр мультислойных сверхрешеток со спин-орбитальным взаимодействием / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // XVIII Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников: Тезисы докладов. — Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2010. — С. 106.
- A25. Тележников, А. В. Динамика электронных волновых пакетов в монослойном графене, находящемся в магнитном поле / А. В. Тележников // XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников: Тезисы докладов. — Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2012. — С. 134.
- A26. Фролова, Е. В. «Шредингеровский кот» в двухслойном графене, помещенном в перпендикулярное магнитное поле / Е. В. Фролова, А. В. Тележников,

Н. А. Кравец // XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников: Тезисы докладов. — Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2012. — С. 132.

A27. Демиховский, В. Я. Эволюция квантовых состояний в тонких пленках топологических изоляторов / В. Я. Демиховский, А. В. Тележников // 13-я международная научная конференция-школа «Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение»: Тезисы докладов. — Саранск: Изд-во Мордовского университета, 2014. — С. 165.

Литература

1. Averbukh, I. Sh. The dynamics of wave packets of highly-excited states of atoms and molecules / I. Sh. Averbukh, N. F. Perel'man // *Sov. Phys. Usp.* — 1991. — Vol. 34. — P. 572.
2. Parker, J. Coherence and decay of Rydberg wave Packets / J. Parker, C. R. Stroud, Jr. // *Phys. Rev. Lett.* — 1986. — Vol. 56. — P. 716.
3. Gaeta, Z. D. Classical and quantum-mechanical dynamics of a quasiclassical state of the hydrogen atom / Z. D. Gaeta, C. R. Stroud, Jr. // *Phys. Rev. A.* — 1990. — Vol. 42. — P. 6308.
4. Romera, E. Revivals, classical periodicity, and zitterbewegung of electron currents in monolayer graphene / E. Romera, F. de los Santos // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 80. — P. 165416.
5. Torres, J. J. Wave packet revivals in a graphene quantum dot in a perpendicular magnetic field / J. J. Torres, E. Romera // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 82. — P. 155419.
6. Bermudez, A. Coherence and decay of Rydberg wave Packets / A. Bermudez, M. A. Martin-Delgado, E. Solano // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 123602.
7. Jaynes, E. T. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser / E. T. Jaynes, F. W. Cummings // *Proc. IEEE.* — 1963. — Vol. 51. — P. 89.
8. Rusin, T. M. Zitterbewegung of relativistic electrons in a magnetic field and its simulation by trapped ions / T. M. Rusin, W. Zawadzki // *Phys. Rev. D.* — 2010. — Vol. 82. — P. 125031.

9. Schrodinger E. Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik / E. Schrodinger // Die Naturwissenschaften. — 1935. — Vol. 23. — P. 807; 823; 844.
10. Krekora, P. Relativistic Electron Localization and the Lack of *Zitterbewegung* / P. Krekora, Q. Su, R. Grobe // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Vol. 93. — P. 043004.
11. Gerritsma, R. Quantum simulation of the Dirac equation / R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zahringer et al. // Nature (London). — 2010. — Vol. 68. — P. 197.
12. Gea-Banacloche, J. Atom- and field-state evolution in the Jaynes-Cummings model for large initial fields / J. Gea-Banacloche // Phys. Rev. A. — 1991. — Vol. 44. — P. 5913.
13. Auffeves, A. Entanglement of a Mesoscopic Field with an Atom Induced by Photon Graininess in a Cavity / A. Auffeves, P. Maioli, T. Meunier // Phys. Rev. Lett. — 2003. — Vol. 91. — P. 230405.
14. Yeazell, J. A. Observation of the collapse and revival of a Rydberg electronic wave packet / J. A. Yeazell, M. Mallalieu, C. R. Stroud, Jr. // Phys. Rev. Lett. — 1990. — Vol. 64. — P. 2007.
15. Averbukh, I. Sh. Wave Packet Isotope Separation / I. Sh. Averbukh, M. J. J. Vrakking, D. M. Villeneuve et al. // Phys. Rev. Lett. — 1996. — Vol. 77. — P. 3518.
16. Monroe, C. A «Schrödinger Cat» superposition state of an atom / C. Monroe, D. Meekhof, B. King et al. // Science. — 1996. — Vol. 272. — P. 1131.
17. Demikhovskii, V. Ya. Space-time evolution of Dirac wave packets / V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, A. A. Perov et al. // Phys. Rev. A. — 2010. — Vol. 82. — P. 052115.
18. Demikhovskii, V. Ya. Wave packet dynamics in a two-dimensional electron gas with spin orbit coupling: Splitting and *zitterbewegung* / V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, E. V. Frolova // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78. — P. 115401.

19. Demikhovskii, V. Ya. Wave packet dynamics in hole Luttinger systems / V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, E. V. Frolova // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81. — P. 115206.
20. Maksimova, G. M. Wave packet dynamics in a monolayer graphene / G. M. Maksimova, V. Ya. Demikhovskii, E. V. Frolova // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78. — P. 235321.
21. Wallace, P. R. The band theory of graphite / P. Wallace // Phys. Rev. — 1947. — Vol. 71. — P. 622.
22. Novoselov, K. S. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al. // Nature. — 2005. — Vol. 438. — P. 197.
23. Mattausch, A. *Ab initio* study of graphene on *SiC* / A. Mattausch, O. Pankratov // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Vol. 99. — P. 076802.
24. Klein, O. Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von Dirac / O. Klein // Z. Phys. — 1929. — Vol. 53. — P. 157.
25. Katsnelson, M. I. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene / M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim // Nat. Phys. — 2006. — Vol. 2. — P. 620.
26. Rusin, T. M. Theory of electron Zitterbewegung in graphene probed by femtosecond laser pulses / T. M. Rusin, W. Zawadzki // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 045416.
27. Thomas, L. H. The Motion of the Spinning Electron / L. H. Thomas // Nature. — 1926. — Vol. 117. — P. 514.
28. Dresselhaus, G. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures / G. Dresselhaus // Phys. Rev. — 1955. — Vol. 100. — P. 580.
29. Бычков, Ю. А. Свойства двумерного электронного газа со снятым вырождением спектра / Ю. А. Бычков, Э. И. Рашба // Письма в ЖЭТФ. — 1984. — Т. 39. — С. 66.

30. Moroz, A. V. Spin-orbit interaction as a source of spectral and transport properties in quasi-one-dimensional systems / A. V. Moroz, C. H. W. Barnes // Phys. Rev. B. — 2000. — Vol. 61. — P. R2464.
31. Pershin, Yu. V. Effect of spin-orbit interaction and in-plane magnetic field on the conductance of a quasi-one-dimensional system / Yu. V. Pershin, J. A. Nesteroff, V. Privman // Phys. Rev. B. — 2004. — Vol. 69. — P. 121306.
32. Волков, Б. А. Безмассовые двумерные электроны в инверсном контакте / Б. А. Волков, О. А. Панкратов // Письма в ЖЭТФ. — 1985. — Т. 42. — С. 145.
33. Murakami, S. Spin-Hall insulator / S. Murakami, N. Nagaosa, S.-C. Zhang // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Vol. 93. — P. 156804.
34. König, M. The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment / M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp et al. // J. Phys. Soc. Jpn. — 2008. — Vol. 77. — P. 031007.
35. Bernevig, B. A. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in *HgTe* quantum wells / B. A. Bernevig, T. L. Hughes, S.-C. Zhang // Science. — 2006. — Vol. 314. — P. 1757.
36. König, M. Quantum spin Hall insulator state in *HgTe* quantum wells / M. König, S. Wiedmann, C. Brüne et al. // Science. — 2007. — Vol. 318. — P. 766.
37. Hsieh, D. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase / D. Hsieh, D. Qian, L. Wray et al. // Nature. — 2008. — Vol. 452. — P. 970.
38. Zhang, H. Topological insulators in *Bi₂Se₃*, *Bi₂Te₃* and *Sb₂Te₃* with a single Dirac cone on the surface / H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi et al. // Nat. Phys. — 2009. — Vol. 5. — P. 438.
39. Ren, Z. Large bulk resistivity and surface quantum oscillations in the topological insulator *Bi₂Te₂Se* / Z. Ren, A. A. Taskin, S. Sasaki et al. // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 82. — P. 241306.
40. Kuroda, K. Experimental Realization of a Three-Dimensional Topological Insulator Phase in Ternary Chalcogenide *TlBiSe₂* / K. Kuroda, M. Ye, A. Kimura et al. // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Vol. 105. — P. 146801.

41. Hsieh, D. A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime / D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian et al. // Nature. — 2009. — Vol. 460. — P. 1101.
42. Fu, L. Topological Crystalline Insulators / L. Fu // Phys. Rev. Lett. — 2011. — Vol. 106. — P. 106802.
43. Tanaka, Y. Experimental realization of a topological crystalline insulator in SnTe / Y. Tanaka, Z. Ren, T. Sato et al. // Nat. Phys. — 2012. — Vol. 8. — P. 800.
44. Volovik, G. E. Fermion zero modes at the boundary of superfluid $^3\text{He} - B$ / G. E. Volovik // Pis'ma v ZhETF. — 2009. — Vol. 90. — P. 440.
45. Guo, Z. L. Möbius graphene strip as a topological insulator / Z. L. Guo, Z. R. Gong, H. Dong et al. // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 195310.
46. Lu, H.-Z. Massive Dirac fermions and spin physics in an ultrathin film of topological insulator / H.-Z. Lu, W.-Y. Shan, W. Yao et al. // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81. — P. 115407.
47. Geim, A. K. The rise of graphene / A. K. Geim, K. S. Novoselov // Nature Materials. — 2007. — Vol. 6. — P. 183.
48. De Martino, A. Magnetic Confinement of Massless Dirac Fermions in Graphene / A. De Martino, L. Dell'Anna, R. Egger // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Vol. 98. — P. 066802.
49. Giavaras, G. Magnetic field induced confinement–deconfinement transition in graphene quantum dots / G. Giavaras, P. A. Maksym, M. Roy // J. Phys.: Condens. Matter. — 2009. — Vol. 21. — P. 102201.
50. Giavaras, G. Tunable quantum dots in monolayer graphene / G. Giavaras, F. Nori // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 85. — P. 165446.
51. Giovannetti, G. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: *Ab initio* density functional calculations / G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks et al. // Phys. Rev. B. — 2007. — Vol. 76. — P. 073103.

52. Lebègue, S. Accurate electronic band gap of pure and functionalized graphane from GW calculations / S. Lebègue, M. Klintonberg, O. Eriksson, M. I. Katsnelson // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79. — P. 245117.
53. Peres, N. M. R. Scattering in one-dimensional heterostructures described by the Dirac equation / N. M. R. Peres // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2009. — Vol. 21. — P. 095501.
54. Giavaras, G. Graphene quantum dots formed by a spatial modulation of the Dirac gap / G. Giavaras, F. Nori // *Appl. Phys. Lett.* — 2010. — Vol. 97. — P. 243106.
55. Park, C.-H. Anisotropic behaviours of massless Dirac fermions in graphene under periodic potentials / C.-H. Park, L. Yang, Y.-W. Son, et al. // *Nature Physics.* — 2008. — Vol. 4. — P. 213.
56. Park, C.-H. Electron Beam Supercollimation in Graphene Superlattices / C.-H. Park, Y.-W. Son, L. Yang et al. // *Nano Lett.* — 2008. — Vol. 8. — P. 2920.
57. Park, C.-H. Landau Levels and Quantum Hall Effect in Graphene Superlattices / C.-H. Park, Y.-W. Son, L. Yang et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 103. — P. 046808.
58. Brey, L. Emerging Zero Modes for Graphene in a Periodic Potential / L. Brey, H. A. Fertig // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 103. — P. 046809.
59. Barbier, M. Extra Dirac points in the energy spectrum for superlattices on single-layer graphene / M. Barbier, P. Vasilopoulos, F. M. Peeters // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81. — P. 075438.
60. Guinea, F. Band structure and gaps of triangular graphene superlattices / F. Guinea, T. Low // *Philos. Trans. R. Soc. A.* — 2010. — Vol. 368. — P. 5391.
61. Lee, J.-H. Energy gap of Kronig-Penney-type hydrogenated graphene superlattices / J.-H. Lee, J. C. Grossman // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 113413.
62. Dell Anna, L. Multiple magnetic barriers in graphene / L. Dell Anna, A. De Martino // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79. — P. 045420.

63. Ramezani Masir, M. Tunneling, conductance, and wavevector filtering through magnetic barriers in bilayer graphene / M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, F. M. Peeters // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79. — P. 035409.
64. Xu, L. Induced chiral Dirac fermions in graphene by a periodically modulated magnetic field / L. Xu, J. An, C.-D. Gong // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81. — P. 125424.
65. Le, V. Q. Magnetic Kronig-Penney-type graphene superlattices: finite energy Dirac points with anisotropic velocity renormalization / V. Q. Le, C. H. Pham, V. L. Nguyen // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2012. — Vol. 24. — P. 345502.
66. Marchini, S. Scanning tunneling microscopy of graphene on Ru(0001) / S. Marchini, S. Günther, J. Winterlin // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 76. — P. 075429.
67. Vázquez de Parga, A. L. Periodically Rippled Graphene: Growth and Spatially Resolved Electronic Structure / A. L. Vázquez de Parga, F. Calleja, B. Borca et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 100. — P. 056807.
68. Sutter, P. W. Epitaxial graphene on ruthenium / P. W. Sutter, J.-I. Flege, E. A. Sutter // *Nature Materials.* — 2008. — Vol. 7. — P. 406.
69. Martoccia, D. Graphene on Ru(0001): A 2525 Supercell / D. Martoccia, P. R. Willmott, T. Brugger et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101. — P. 126102.
70. Yan, H. Superlattice Dirac points and space-dependent Fermi velocity in a corrugated graphene monolayer / H. Yan, Z.-D. Chu, W. Yan et al. // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 075405.
71. McKellar, B. H. J. Klein paradox and the Dirac-Kronig-Penney model / B. H. J. McKellar, G. J. Stephenson, Jr. // *Phys. Rev. A.* — 1987. — Vol. 36. — P. 2566.
72. Ratnikov, P. V. Superlattice based on graphene on a strip substrate / P. V. Ratnikov // *JETP Lett.* — 2009. — Vol. 90. — P. 469.

73. Тамм, И. Е. О возможности связанных состояний электронов на поверхности кристалла / И. Е. Тамм // ЖЭТФ. — 1933. — Т. 3. — С. 34.
74. James, H. M. Electronic States in Perturbed Periodic Systems / H. M. James // Phys. Rev. — 1949. — Vol. 76. — P. 1611.
75. Žutić, I. Spintronics: Fundamentals and applications / I. Žutić, J. Fabian, S Das Sarma // Rev. Mod. Phys. — 2004. — Vol. 76. — P. 323.
76. Demikhovskii, V. Ya. Spin-orbit lateral superlattices: Energy bands and spin polarization in 2DEG / V. Ya. Demikhovskii, D. V. Khomitsky // JETP Lett. — 2006. — Vol. 83. — P. 399.
77. Шляйх, В. П. Квантовая оптика в фазовом пространстве / В. П. Шляйх. — Москва: Физматлит, 2005. — P. 760.
78. Тележников, А. В. Динамика электронных волновых пакетов в монослойном графене, находящемся в магнитном поле / А. В. Тележников // Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников: Тезисы докладов XIX школы по физике полупроводников. — Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2012. — С. 134.
79. Rusin, T. M. Zitterbewegung of electrons in graphene in a magnetic field / T. M. Rusin, W. Zawadzki // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78. — P. 125419.
80. Wehling, T. O. Molecular Doping of Graphene / T. O. Wehling, K. S. Novoselov, S. V. Morozov et al. // Nano Lett. — 2008. — Vol. 8. — P. 173.
81. Rusin, T. M. Transient Zitterbewegung of charge carriers in mono- and bilayer graphene, and carbon nanotubes / T. M. Rusin, W. Zawadzki // Phys. Rev. B. — 2007. — Vol. 76. — P. 195439.
82. Demikhovskii, V. Ya. Long-term cyclotron dynamics of relativistic wave packets: Spontaneous collapse and revival / V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, A. A. Perov et al. // Phys. Rev. A. — 2012. — Vol. 85. — P. 022105.
83. Gusynin, V. P. Ac conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1-dimensional quantum electrodynamics / V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte // Int. J. Mod. Phys. B. — 2007. — Vol. 21. — P. 4611.

84. Bena, I. Remarks on the tight-binding model of graphene / C. Bena, G. Montambaux. — 2007. — arXiv: 0712.0765.
85. Zhang, L. Multimode electron transport through quantum waveguides with spin-orbit interaction modulation: Applications of the scattering matrix formalism / L. Zhang, P. Brusheim, H.Q. Xu // Phys. Rev. B. — 2005. — Vol. 72. — P. 045347.
86. Das, B. Zero-field spin splitting in a two-dimensional electron gas / B. Das, S. Datta, R. Reifenberger // Phys. Rev. B. — 1990. — Vol. 41. — P. 8278.
87. Luo, J. Effects of inversion asymmetry on electron energy band structures in GaSb/InAs/GaSb quantum wells / J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang et al. // Phys. Rev. B. — 1990. — Vol. 41. — P. 7685.
88. Landauer, R. Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction / R. Landauer // IBM J. Res. Dev. — 1957. — Vol. 1. — P. 223.
89. Hasan, M. Z. Colloquium: Topological insulators / M. Z. Hasan, C. L. Kane // Rev. Mod. Phys. — 2010. — Vol. 82. — P. 3045.
90. Zhang, H. Topological insulators in Bi_2Se_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface / H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi et al. // Nat. Phys. — 2009. — Vol. 5. — P. 438.
91. Shen, S.-Q. Topological Insulators. Dirac Equation in Condensed Matters / S.-Q. Shen. — Berlin: Springer, 2012. — P. 225.
92. Qi, H.-L. Topological insulators and superconductors / H.-L. Qi, S. C. Zhang // Rev. Mod. Phys. — 2011. — Vol. 83. — P. 1057.
93. Карпман, В. И. Нелинейные волны в диспергирующих средах / В. И. Карпман. — Москва: Наука, 1973. — С. 175.
94. Ratnikov, P. V. Size quantization in planar graphene-based heterostructures: Pseudospin splitting, interface states, and excitons / P. V. Ratnikov, A. P. Silin // JETP. — 2012. — Vol. 114. — P. 512.

95. Arovas, D. P. Dirac spectrum in piecewise constant one-dimensional (1D) potentials / D. P. Arovas, L. Brey, H. A. Fertig et al. // *New J. Phys.* — 2010. — Vol. 12. — P. 123020.
96. Barbier, M. Dirac and Klein-Gordon particles in one-dimensional periodic potentials / M. Barbier, F. M. Peeters, P. Vasilopoulos, J. M. Pereira, Jr. // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 115446.
97. Kotov, V. Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives / V. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2012. — Vol. 84. — P. 1067.
98. Uchoa, B. The electron many-body problem in graphene / B. Uchoa, J. P. Reed, Y. Gan et al. // *Phys. Scr.* — 2012. — Vol. 146. — P. 014014.
99. González, J. Non-Fermi liquid behavior of electrons in the half-filled honeycomb lattice (A renormalization group approach) / J. González, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano // *Nucl. Phys. B.* — 1994. — Vol. 424. — P. 595.
100. Luican, A. Quantized Landau level spectrum and its density dependence in graphene / A. Luican, G. Li, E. Y. Andrei // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 83. — P. 041405.
101. Elias, D. C. Dirac cones reshaped by interaction effects in suspended graphene / D. C. Elias, R. V. Gorbachev, A. S. Mayorov et al. // *Nat. Phys.* — 2011. — Vol. 7. — P. 701.
102. Siegel, D. A. Many-body interactions in quasi-freestanding graphene / D. A. Siegel, C. Park, C. Hwang et al. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* — 2011. — Vol. 108. — P. 11365.
103. Sinner, A. Effect of the Coulomb interaction on the gap in monolayer and bilayer graphene / A. Sinner, K. Ziegler // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 82. — P. 165453.
104. Ratnikov, P. V. Boundary states in graphene heterojunctions / P. V. Ratnikov, A. P. Silin // *Phys. Solid State.* — 2010. — Vol. 52. — P. 1763.
105. Ivchenko, E. L. Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena / E. L. Ivchenko and G. E. Pikus. — Berlin: Springer, 1995. — P. 381.

106. Eltoukhy, A. H. Compositionally modulated sputtered *InSb/GaSb* superlattices: crystal growth and interlayer diffusion / A. H. Eltoukhy and J. E. Greene // J. Appl. Phys. — 1979. — Vol. 50(1). — P. 505.
107. Perel', V. I. Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier / V. I. Perel', S. A. Tarasenko, I. N. Yassievich // Phys. Rev. B. — 2003. — Vol. 67. — P. 201304(R).
108. Glazov, M. M. Spin-dependent resonant tunneling in symmetrical double-barrier structures / M. M. Glazov, P. S. Alekseev, M. A. Odnoblyudov et al. // Phys. Rev. B. — 2005. — Vol. 71. — P. 155313.
109. Sukhanov, A. A. Interface states in two-dimensional electron systems with spin-orbital interaction / A. A. Sukhanov, V. A. Sablikov // J. Phys.: Condens. Matter. — 2011. — Vol. 23. — P. 395601.
110. Ganichev, S. D. Intense Terahertz Excitation of Semiconductors / S. D. Ganichev, W. Prettl. — New York: Oxford University Press, 2006. — P. 418.
111. Gradshteyn, I. S. Tables of Integrals, Series and Products / I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik. — New York: Academic, 1980. — C. 760.

Приложение А

В данном приложении находится приближенное выражение для средней скорости электрона для параметров пакета $qa \gg 1$ и $\lambda/a \ll 1$ (считается, что $qa \simeq 5$, $\lambda/a \simeq 0,1$). Соответствующая волновая функция (1.21) представляет собой квантовую суперпозицию состояний с резким максимумом вблизи достаточно большого значения $n = n_0$. Действительно, для $(qa)^2/2 \gg 1$ распределение Пуассона $|c_n|^2$ (см. формулу (1.24)) можно заменить гауссовским

$$e^{-(qa)^2/2} \frac{\left(\frac{(qa)^2}{2}\right)^n}{n!} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0}} \exp\left(-\frac{(n - n_0)^2}{2n_0}\right), \quad (\text{A.1})$$

где $n_0 \simeq (qa)^2/2 \simeq 12$, а дисперсия $\Delta n \simeq \sqrt{n_0}$. Далее можно разложить безразмерный энергетический спектр φ_n в ряд по степеням $(n - n_0)$, ограничиваясь квадратичными членами [1, 4]

$$\varphi_n = \varphi_{n_0} + \varphi'_{n_0}(n - n_0) + \frac{\varphi''_{n_0}}{2}(n - n_0)^2. \quad (\text{A.2})$$

Для данных значений параметров пакета величина φ_n близка к 1, и коэффициенты перед экспонентами в уравнении (1.26) могут быть хорошо аппроксимированы выражениями

$$\sqrt{\frac{\varphi_{n+1} - 1}{2(n+1)\varphi_{n+1}}} \simeq \frac{\lambda/a}{\sqrt{2}}, \quad \sqrt{\frac{\varphi_n + 1}{\varphi_n}} \simeq \sqrt{2}, \quad (\text{A.3})$$

что позволяет вычислить сумму по n в (1.26). В результате имеем:

$$\begin{aligned} \bar{v}_x(\tau) = & \frac{\hbar q}{m} \exp\left(-\left(qa \sin \frac{\varphi''_{n_0} \tau}{2}\right)^2\right) \times \\ & \times \cos\left(\frac{\varphi''_{n_0} \tau}{2}\right) \cos\left(\varphi'_{n_0} \tau - \varphi''_{n_0} \left(\frac{(qa)^2}{2} - 1\right) \tau + \frac{(qa)^2}{2} \sin \varphi''_{n_0} \tau\right), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \bar{v}_y(\tau) = & \frac{\hbar q}{m} \exp\left(-\left(qa \sin \frac{\varphi''_{n_0} \tau}{2}\right)^2\right) \times \\ & \times \cos\left(\frac{\varphi''_{n_0} \tau}{2}\right) \sin\left(\varphi'_{n_0} \tau - \varphi''_{n_0} \left(\frac{(qa)^2}{2} - 1\right) \tau + \frac{(qa)^2}{2} \sin \varphi''_{n_0} \tau\right). \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Из этих выражений видно, что осцилляции средней скорости со временем экспоненциально затухают. Соответствующее время затухания определено в выражении (1.30).

Приложение В

i) Здесь более подробно выводится выражение для волновой функции (1.25). Для этого необходимо провести интегрирование по p . Соответствующий интеграл имеет вид

$$Q_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_p(x) g(p) \phi_k(y - y_c(p)) dp, \quad (\text{B.1})$$

где $\varphi_p(x) = (1/\sqrt{2\pi\hbar}) \exp(ipx/\hbar)$ ($g(p)$ определено в выражении (1.23)), а $\phi_k(y - y_c(p))$ – хорошо известные функции гармонического осциллятора. Подставляя эти выражения в (B.1) и используя преобразование Гаусса для полиномов Эрмита $H_k(y)$ [111],

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-y)^2} H_k(y) dy = (2x)^k, \quad (\text{B.2})$$

окончательно получаем

$$Q_k = \frac{((y - qa^2 - ix)/a)^k}{\sqrt{2^{k+1}k!\pi a^2}} \exp\left(\frac{2ix(y + qa^2) - x^2 - (y - qa^2)^2}{4a^2}\right). \quad (\text{B.3})$$

Подставляя это выражение в (1.25) и используя полярные координаты (1.33), получаем выражение (1.32).

ii) Теперь вычислим электронную волновую функцию $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{cl}(\mathbf{r}, t)$ на малых временах $t \ll T_D$, когда можно пренебречь квадратичными слагаемыми в разложении (A.2). Тогда, учитывая что для данного волнового пакета коэффициенты d_n и b_n могут быть аппроксимированы выражениями $d_n \simeq 1$ и

$b_n \simeq \sqrt{n/2}\lambda/a$, после суммирования в (1.32) получаем

$$\psi_{cl}(\rho, \theta, t) = \frac{M(\rho, \theta)}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} S\left(\theta + \frac{2\pi t}{T_{cl}}\right) e^{-i\left(\frac{\varepsilon_{n_0}}{\hbar} + \frac{2\pi}{T_{cl}}(1-n_0)\right)t} \times \\ \times \left(\alpha, \beta e^{i\frac{2\pi t}{T_{cl}}}, \frac{\beta q \lambda}{2}, -\frac{\alpha \lambda \rho}{2a} e^{-i\theta}\right)^T, \quad (\text{B.4})$$

где

$$S(u) = \exp\left(-\frac{qa\rho}{2}(\cos u - i \sin u)\right), \quad (\text{B.5})$$

а $M(\rho, \theta)$ определено в (1.34). Решение (B.4) описывает когерентный слаборелятивистский волновой пакет, распространяющийся вдоль циклотронной орбиты без изменения своей формы. В частности, при $\alpha = \beta$ соответствующая плотность вероятности имеет гауссову форму

$$|\psi_{cl}(\rho, \theta, t)|^2 = \\ = \frac{1 + \frac{\lambda^2}{8a^2}(\rho^2 + (qa)^2)}{2\pi a^2} \exp\left(-\frac{\rho^2 + (qa)^2 + 2\rho qa \cos(\theta + 2\pi t/T_{cl})}{2}\right). \quad (\text{B.6})$$

Очевидно, что центр волнового пакета, положение которого определяется углом

$$\theta_c = \pi - \frac{2\pi t}{T_c}, \quad (\text{B.7})$$

вращается с циклотронной частотой $\omega_c = 2\pi/T_c$ подобно движению классического электрона в магнитном поле.

Приложение С

Покажем, что волновой пакет (уравнения (1.50), (1.51)) при $t_0 = T_{cl}/4$ представляет собой когерентную суперпозицию мезоскопических состояний [6], [12]. Для этого рассмотрим временную эволюцию начального состояния вида

$$\psi_+(\mathbf{r}, 0) = \psi_c(\mathbf{r})|+\rangle, \quad (\text{C.1})$$

где «орбитальная» волновая функция когерентного состояния $\psi_c(\mathbf{r})$ дается выражением (1.51), а начальный дираковский спинор $|+\rangle$ имеет вид

$$|+\rangle = d_{n_0} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ 0 \end{pmatrix} + b_{n_0} \begin{pmatrix} 0 \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

с коэффициентами d_{n_0} и b_{n_0} , определяемыми выражением (1.15). Здесь, как и ранее, учитываем, что среднее значение n в (1.52) достаточно велико: $\bar{n} = (qa)^2/2 = n_0 \gg 1$.

Состояние (C.1) эволюционирует как

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \int dp \varphi_p(x) g(p) \left[\sum_{n=1} c_n^+ \begin{pmatrix} d_n \phi_{n-1}(y - y_c) |\uparrow\rangle \\ -b_n \phi_n(y - y_c) |\downarrow\rangle \end{pmatrix} e^{-i\varphi_n \tau} + \sum_{n=0} c_n^- \begin{pmatrix} b_n \phi_{n-1}(y - y_c) |\uparrow\rangle \\ d_n \phi_n(y - y_c) |\downarrow\rangle \end{pmatrix} e^{i\varphi_n \tau} \right], \quad (\text{C.3})$$

где коэффициенты c_n^\pm есть

$$c_n^+ = c_n d_{n_0} d_n - c_{n+1} b_{n_0} b_n, \quad c_n^- = c_n d_{n_0} b_n + c_{n+1} b_{n_0} b_n. \quad (\text{C.4})$$

Используя слабую зависимость коэффициентов d_n и b_n от n , а также принимая во внимание выражение для c_n (1.24), из (C.4) при $n \simeq n_0 \gg 1$ можно получить:

$$c_n^+ = c_n, \quad c_n^- = 0. \quad (\text{C.5})$$

Далее, нетрудно показать, что

$$\psi_+(\mathbf{r}, \tau) = \left(e^{-i\varphi'_{n_0}\tau} d_{n_0} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ 0 \end{pmatrix} + b_{n_0} \begin{pmatrix} 0 \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \right) \psi_{c_+}(\mathbf{r}, \tau), \quad (\text{C.6})$$

где

$$\psi_{c_+}(\mathbf{r}, \tau) = \int dp \varphi_p(x) g(p) \sum_{n=0} c_{n+1} \phi_n(y - y_c) e^{-i\varphi_n \tau}. \quad (\text{C.7})$$

Таким же образом можно вычислить эволюцию начального состояния

$$\psi_-(\mathbf{r}, 0) = \psi_c(\mathbf{r}) |-\rangle, \quad (\text{C.8})$$

$$|-\rangle = b_{n_0} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ 0 \end{pmatrix} - d_{n_0} \begin{pmatrix} 0 \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{C.9})$$

$$\psi_-(\mathbf{r}, \tau) = \left(e^{i\varphi'_{n_0}\tau} b_{n_0} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ 0 \end{pmatrix} - d_{n_0} \begin{pmatrix} 0 \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \right) \psi_{c_-}(\mathbf{r}, \tau), \quad (\text{C.10})$$

где $\psi_{c_-}(\mathbf{r}, \tau)$ определено формулой (C.7), в которой $\exp(-i\varphi_n \tau)$ должно быть заменено на $\exp(i\varphi_n \tau)$. Заметим, что начальные спиновые функции ортогональны: $\langle + | - \rangle = 0$.

Далее, начальный волновой пакет (1.50) может быть представлен в виде суперпозиции

$$\psi_c(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ 0 \end{pmatrix} = d_{n_0} \psi_+(\mathbf{r}, 0) + b_{n_0} \psi_-(\mathbf{r}, 0), \quad (\text{C.11})$$

так что

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = d_{n_0} \psi_+(\mathbf{r}, \tau) + b_{n_0} \psi_-(\mathbf{r}, \tau) \quad (\text{C.12})$$

описывает два подпакета, которые при $t < T_{cl} = (2\pi/\varphi'_{n_0})\lambda/c$ вращаются против часовой стрелки ($\psi_+(\mathbf{r}, \tau)$) и по часовой стрелке ($\psi_-(\mathbf{r}, \tau)$) в плоскости xy . В

момент времени $t_0 = T_{cl}/4$, как следует из уравнений (C.6) и (C.10),

$$\left| \langle + | - \rangle \Big|_{t=t_0} \right| = \sqrt{\frac{2n_0(\lambda/a)^2}{1 + 2n_0(\lambda/a)^2}} \approx 0,98 \quad (\text{C.13})$$

для $n_0 = 50$ и значения $\lambda/a = 0,5$. Таким образом, можно заключить, что спиновые части волновых функций $\psi_{\pm}(\mathbf{r}, t)$ отличаются незначительно. Это означет, что «орбитальная» часть полной волновой функции (C.12) в этот момент времени представляет собой суперпозицию мезоскопических состояний $\psi_{c+}(\mathbf{r}, t_0)$ и $\psi_{c-}(\mathbf{r}, t_0)$ (так называемое состояние типа «Шредингеровский кот»). Соответствующая плотность вероятности $|\psi(\mathbf{r}, t_0 = T_{cl}/4)|^2$ представлена на рис.1.7(b). Возможность существования когерентной суперпозиции мезоскопических состояний для дираковской частицы, помещенной в магнитное поле, было предсказано в работе [6].