

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова  
Российской академии наук



На правах рукописи

Гиндикин Яков Владимирович

**Эффекты парного спин-орбитального взаимодействия  
и коррелированные состояния в низкоразмерных электронных  
системах**

Специальность 01.04.10 —  
«Физика полупроводников»

Диссертация на соискание учёной степени  
доктора физико-математических наук

Научный консультант:  
доктор физико-математических наук  
Сабликов Владимир Алексеевич

Фрязино — 2021

# Оглавление

	Стр.
<b>Введение</b> . . . . .	5
<b>Глава 1. Короткомасштабные корреляции электронов в одномерных системах</b> . . . . .	20
1.1 Введение . . . . .	20
1.2 Проблема описания короткомасштабных корреляций: оператор плотности . . . . .	23
1.3 Динамическая восприимчивость латтинджеровой жидкости . . . . .	26
1.4 Неинвазивные транспортные измерения: диссипативная проводимость	30
1.5 Мягкая мода в спектре коллективных возбуждений . . . . .	33
1.6 Заключение . . . . .	35
<b>Глава 2. Коррелированное электронное состояние в одномерных квантовых точках</b> . . . . .	37
2.1 Введение . . . . .	37
2.2 Деформированный вигнеровский кристалл в одномерной квантовой точке . . . . .	42
2.2.1 Гамильтониан одномерной квантовой точки . . . . .	42
2.2.2 Точная диагонализация . . . . .	47
2.2.3 Теория ограниченной латтинджеровой жидкости . . . . .	50
2.2.4 Модель вигнеровской молекулы . . . . .	52
2.2.5 Бозонизация, соблюдающая сохранение числа частиц . . . . .	56
2.3 Эффекты электрон-электронного взаимодействия в синглет-триплетных переходах в одномерных квантовых точках . . . . .	62
2.3.1 Аналитическая модель с короткодействием . . . . .	63
2.3.2 Дальнодействие: точная диагонализация . . . . .	67
2.4 Зондовая манипуляция спином электронов в одномерных квантовых точках . . . . .	71

	Стр.
2.5	Заключение . . . . . 83
<b>Глава 3.</b>	<b>Парное спин-орбитальное взаимодействие . . . . . 86</b>
3.1	Введение . . . . . 86
3.2	Парное спин-орбитальное взаимодействие в физике конденсированного состояния . . . . . 88
3.2.1	Одночастичное спин-орбитальное взаимодействие . . . . . 90
3.2.2	Двухчастичное спин-орбитальное взаимодействие Брейта . . . 91
3.2.3	Парное спин-орбитальное взаимодействие в кристаллах . . . 93
3.3	Парное спин-орбитальное взаимодействие в низкоразмерных системах 95
3.3.1	Квантовые провода . . . . . 96
3.3.2	Двумерные системы . . . . . 98
3.4	Спин-орбитальный механизм электронного спаривания . . . . . 101
3.4.1	Связанные электронные пары в квантовых проводах . . . . . 102
3.4.2	Связанные электронные пары в двумерных системах . . . . . 109
3.4.3	Связанные электронные пары в симметричных двумерных слоях . . . . . 123
3.4.4	Связанные электронные пары в двумерных слоях с затвором 127
3.4.5	Кулоновская примесь в двумерных материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием . . . . . 137
3.5	Заключение . . . . . 145
<b>Глава 4.</b>	<b>Коррелированное электронное состояние с парным спин-орбитальным взаимодействием . . . . . 148</b>
4.1	Неустойчивость основного состояния: среднеполевой подход . . . . 150
4.2	Коллективные возбуждения одномерной электронной жидкости с парным спин-орбитальным взаимодействием . . . . . 153
4.2.1	Приближение случайных фаз . . . . . 154
4.2.2	Метод бозонизации . . . . . 163

4.3	Динамика одномерной электронной системы с нарушенным спин-зарядовым разделением . . . . .	167
4.4	Диссипативная проводимость квантового провода с парным спин-орбитальным взаимодействием . . . . .	175
4.5	Заключение . . . . .	181
<b>Заключение . . . . .</b>		<b>184</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>		<b>188</b>
<b>Приложение А. Метод бозонизации . . . . .</b>		<b>214</b>
A.1	Бозонизация на кольце . . . . .	215
A.2	Бозонизация в боксе . . . . .	218
<b>Приложение Б. Электростатика двумерного слоя с затвором . . . . .</b>		<b>222</b>
<b>Приложение В. Асимптотика нулей функции Макдональда . . . . .</b>		<b>224</b>
<b>Приложение Г. Диагонализация гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия . . . . .</b>		<b>226</b>

## Введение

**Актуальность темы.** Одним из главных источников нетривиальных эффектов в физике конденсированного состояния является электрон-электронное взаимодействие [1]. В нормальных металлах оно приводит к универсальной картине ферми-жидкости Ландау [2–4]. Всякое отклонение от этой картины привлекает большое внимание, поскольку при этом возникает неординарное поведение электронов, важное как с точки зрения академической науки, так и для приложений. Достаточно назвать сверхпроводимость [5; 6], особенно высокотемпературную [7], экситонные изоляторы, квантовые фазовые переходы [8], тяжелые фермионы, эффект Кондо [9], и так далее.

Роль электрон-электронного взаимодействия растет при уменьшении размерности электронной системы. Благодаря межэлектронному взаимодействию в низкоразмерных системах возникает широкий спектр явлений, невозможных в объемных материалах. Наиболее важными низкоразмерными системами являются квантовые провода (полупроводниковые провода [10], органические металлы [11], углеродные нанотрубки [12], проводящие полимеры), квантовые точки [13; 14], двумерный электронный газ, поверхности топологических изоляторов [15; 16], слоистые материалы (графен, силицен, дихалькогениды переходных металлов, слои  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{BiSb}$  и другие [17–24]). Низкоразмерные системы возникают практически во всех мезоскопических структурах, таких как квантовые точечные контакты, квантовые перетяжки в двумерном электронном газе, открытые квантовые точки, одноэлектронные транзисторы, кольца Ааронова-Бома [25]. Изучение низкоразмерных систем в последнее время выделилось в отдельное направление физики.

Совместные проявления квантовых эффектов и электрон-электронного взаимодействия в низкоразмерных системах приводят к исключительному разнообразию электронных состояний и корреляций. В одномерном случае даже слабое межэлектронное взаимодействие приводит к парадигматическому примеру нефермижидкостного поведения — латтинджеровой жидкости, которая характе-

ризуется отсутствием фермионных квазичастиц, спин-зарядовым разделением, и возникновением короткомасштабных корреляций, описывающих ближний порядок в жидкости [26—28]. Взаимодействием обусловлены и разнообразные состояния двумерного электронного газа в магнитном поле (лафлиновская жидкость, композитные фермионы [29; 30]), переходы металл-диэлектрик в двумерных системах с беспорядком, страйп-фазы [31], нематические фазы [32], и так далее.

Сейчас одной из центральных тем физики конденсированного состояния является изучение низкоразмерных электронных систем с сильным спин-орбитальным взаимодействием [33—35]. Оно определяет структуру фаз и возбуждений топологических изоляторов [36], играет принципиальную роль в спиновой генерации и управлении спином [37], приводит к возникновению кривизны Берри [38] и спинного эффекта Холла [39]. Наиболее перспективная реализация топологических сверхпроводников и майорановских мод также опирается на использование материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием [40].

Чрезвычайно большой интерес вызывает исследование эффектов электрон-электронного взаимодействия в условиях сильной спин-орбитальной связи, поскольку при этом открываются перспективы для появления содержательно новых физических эффектов: образование новых коррелированных состояний, устойчивых композитных частиц с нетривиальными свойствами, возникновение необычных коллективных возбуждений, радикальная перестройка основного состояния и образование неравновесных состояний с нетривиальной структурой [41]. В настоящее время это магистральное направление исследований в ведущих мировых центрах в области теории конденсированного состояния и фундаментальной физики наноструктур.

Наиболее интересный вопрос связан с проявлением спин-орбитального взаимодействия электронов непосредственно в электрон-электронном взаимодействии. В контексте релятивистской квантовой механики было показано, что межэлектронное взаимодействие зависит не только от заряда частиц и расстояния между ними, но и от их спинов и импульсов [42; 43]. Этот замечательный результат долгое время не получал в физике конденсированного состояния заслуженного внимания. Между тем, он принципиально важен для современных низкоразмерных систем

с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы [33]. В этом случае спин-орбитальная компонента парного взаимодействия электронов, которая является слабой в нерелятивистском приближении в вакууме, оказывается столь же сильной, сколь и рашбовское спин-орбитальное взаимодействие, и приводит к радикальной перестройке коррелированного электронного состояния.

**Целью работы** является выявление и исследование новых эффектов электрон-электронного взаимодействия в актуальных низкоразмерных системах: квантовых проводках, одномерных квантовых точках и двумерных системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие теоретические **задачи**:

1. Построить теорию парного спин-орбитального взаимодействия в различных низкоразмерных структурах, принимая во внимание геометрию электрических полей, порождающих это взаимодействие.
2. Исследовать образование за счет парного спин-орбитального взаимодействия связанных электронных пар и построить их классификацию в зависимости от характера движения электронов.
3. Исследовать устойчивость латтинджеровой жидкости с парным спин-орбитальным взаимодействием, изучить ее динамическую зарядовую и спиновую восприимчивости, определить спектр и спин-зарядовую структуру коллективных возбуждений.
4. Изучить динамический транспорт электронов в одномерных системах с парным спин-орбитальным взаимодействием.
5. Исследовать эффекты короткомасштабных электронных корреляций в основном состоянии и динамическом транспорте электронов в квантовых проводках и в одномерных квантовых точках.
6. Исследовать обусловленные электрон-электронным взаимодействием переходы между состояниями с различной спиновой структурой в одномерных квантовых точках.

Рассмотренные в диссертации задачи, при всем их разнообразии, объединены тем, что новая физика в поведении изучаемых систем обусловлена электрон-электронным взаимодействием.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Спин-орбитальное взаимодействие дает вклад в парное электрон-электронное взаимодействие, сравнимый с кулоновским отталкиванием в материалах с большим эффектом Рашбы.
2. Парное спин-орбитальное взаимодействие приводит к притяжению электронов в определенных спиновых конфигурациях, привязанных к их импульсу. В результате возникают связанные электронные пары двух различных типов в зависимости от характера движения электронов: релятивные и конвективные. Их энергией связи можно управлять электрическими методами.
3. В многоэлектронных системах благодаря парному спин-орбитальному взаимодействию возникает неустойчивость по отношению к флуктуациям плотности заряда. Одна из двух мод коллективных возбуждений одномерной системы смягчается в длинноволновой части спектра, а зарядовая жесткость на пороге неустойчивости обращается в ноль.
4. Парное спин-орбитальное взаимодействие нарушает спин-зарядовое разделение между коллективными возбуждениями в латтинджеровой жидкости и перенормирует их скорости. Образующиеся моды имеют смешанную спин-зарядовую структуру и совместно дают вклад в электрический отклик системы.
5. Частотная зависимость динамического адмиттанса квантовых проводов содержит осцилляционную структуру с двумя характерными частотами, которые соответствуют резонансам Фабри-Перо, и определяются скоростями обеих мод коллективных возбуждений.
6. Спин-орбитальное взаимодействие, порождаемое нестационарным внешним электрическим полем, приводит к возникновению зарядового и спинового тока в квантовых проводах даже в отсутствие тянущего электрического

поля. Величиной токового отклика можно управлять с помощью напряжения на затворе.

7. Благодаря короткомасштабным электронным корреляциям в одномерной квантовой точке формируется вигнеровская молекула, деформация которой за счет границ системы приводит к  $\delta$ -образной особенности функции распределения по одночастичным состояниям и к пороговой зависимости фурье-спектра электронной плотности. В спектре коллективных возбуждений системы возникает мягкая мода в окрестности удвоенного фермиевского волнового числа.
8. Спиновое состояние вигнеровской молекулы в одномерной квантовой точке и синглет-триплетный переход управляются локальным электрическим потенциалом или модуляцией электрон-электронного взаимодействия.

**Научная новизна и достоверность.** Все результаты диссертационной работы получены впервые, а их достоверность обусловлена адекватным выбором формализма, основанного на применении наиболее продвинутых и надежных методов современной теоретической физики. Во многих случаях выполнено сравнение результатов, полученных в различных подходах, а также, где это возможно, сопоставление численных и аналитических расчетов. В пользу высокой достоверности результатов свидетельствует также их внутренняя непротиворечивость.

**Методы исследования и практическая значимость.** Для решения поставленных задач используется комбинация современных методов физики конденсированного состояния, включая теорию латтинджеровой жидкости, бозонизацию, метод функций Грина, методы квантовой физической кинетики, методы конфигурационного взаимодействия. В диссертации получены качественно новые результаты, которые могут внести существенный вклад в развитие теории наноразмерных и мезоскопических электронных систем, способствовать объяснению имеющихся экспериментов и стимулировать постановку новых. Так, в работе впервые указано на существование и значительную роль парного спин-орбитального взаимодействия в актуальных низкоразмерных электронных системах. Предсказано образование связанных электронных пар благодаря этому взаимодействию, при этом открыт

новый квантово-механический механизм образования связанных состояний по типу конвективной неустойчивости. Существование таких связанных электронных пар может лечь в основу необычных механизмов сверхпроводимости и привести к созданию новых сверхпроводящих материалов. Также в диссертации указано на возможность сильной перестройки состояния электронной системы вследствие парного спин-орбитального взаимодействия, и образования нового коррелированного состояния. В работе предсказаны эффекты парного спин-орбитального взаимодействия в электронном транспорте в квантовых проводках и предложены перспективные методы транспортных измерений, в которых эти эффекты должны себя проявить. Развита в диссертации теория парного спин-орбитального взаимодействия может быть обобщена и для других систем с сильным эффектом Рашбы, а также систем со схожими гамильтонианами (топологические изоляторы, вейлевские полуметаллы, монослои дихалькогенидов переходных металлов).

**Апробация работы.** Результаты исследований, включенные в диссертацию, докладывались на научных семинарах ФТИ им. Иоффе РАН, ФИАН им. Лебедева, ИФП им. Капицы РАН, ИФТТ РАН, ИТПЭ РАН, Физического Факультета МГУ, Курчатовского Института, ИРЭ им. Котельникова РАН; на Совещании по теории твердого тела (ФТИ им. Иоффе, С.-Петербург, 2019 г.), на 21-м международном симпозиуме “Нанофизика и наноэлектроника” (Нижний Новгород, 2017г.), 12-й Школе молодых ученых “Актуальные проблемы физики” (Звенигород, 2008 г.), на 19-м всероссийском симпозиуме “Современная физическая химия” (Туапсе, 2007 г.), на 1-й и 2-й конференциях “Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика” (Саратов, 2006 г. и 2007 г.), на 9-м, 7-м, 4-м и 2-м конкурсе молодых ученых (ИРЭ РАН, Москва, 2013 г., 2011 г., 2008 г. и 2007 г.), на 23-й международной конференции по физике низких температур (Хиросима, Япония, 2002 г.), на международных симпозиумах ”Наноструктуры: физика и технология” (С.-Петербург, 2001 г. и 2002 г.), на 3-й международной конференции ”Физика низкоразмерных структур” (Черноголовка, 2001 г.), на IV Российской конференции по физике полупроводников ”Полупроводники 99” (Новосибирск, 1999 г.).

**Личный вклад автора.** Все результаты диссертации получены лично автором. Вклад автора в постановку задач является определяющим. Автором разработаны методы решения, проведены теоретические исследования и численное моделирование. Анализ и интерпретация полученных результатов проводились автором как самостоятельно, так и при участии соавторов.

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 20 научных работах в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и четырёх приложений. Полный объём диссертации составляет 228 страниц, включая 56 рисунков. Список литературы содержит 291 наименование.

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулирована цель диссертации и поставленные в ней задачи, обоснованы новизна и практическая ценность полученных результатов, изложено содержание диссертации по главам.

**Первая** глава посвящена изучению короткомасштабных электронных корреляций в одномерных системах и их проявлений в динамическом транспорте. В ходе рассмотрения аналитического аппарата бозонизации установлено, что стандартный оператор плотности латтинджерской модели не сохраняет число частиц в системе или, иными словами, нарушает ее полную электронейтральность. Взамен разработан формализм, соблюдающий сохранение числа частиц. С его помощью найден корректный оператор плотности, пригодный для описания идеальной одномерной системы и одномерной квантовой точки. Вычислена и проанализирована динамическая зарядовая восприимчивость латтинджерской жидкости. Установлено, что дальнострующее взаимодействие усиливает расходимость восприимчивости в окрестности удвоенного фермиевского волнового вектора  $2k_F$ , а при конечной температуре сингулярность откликов в коротковолновой области сглаживается. Рассмотрена проблема неинвазивного измерения проводимости квантового провода. Предложена схема измерения диссипативной проводимости при локальном возмущении системы

переменным полем проводящего зонда. Показано, что в динамическую проводимость латтинджеровой жидкости дают вклад как длинноволновые, так и короткомасштабные корреляции электронов. При этом эффект короткомасштабных корреляций в проводимости значителен и сильно зависит от величины электрон-электронного взаимодействия. Найдено, что динамическая диссипативная проводимость квантового провода при локальном возмущении определяется в низкочастотном пределе короткомасштабными корреляциями электронов, а не длинноволновыми корреляциями, как это обычно считалось [44]. Основным результатом главы состоит в том, что короткомасштабные корреляции электронов приводят к качественно новому поведению коллективной зарядовой моды в одномерной электронной жидкости. В области  $q \approx 2k_F$  частота моды уменьшается до нуля. Иными словами, благодаря короткомасштабным корреляциям в системе возникает мягкая мода в отсутствие электрон-фононного взаимодействия. Мягкая мода является незатухающей при нуле градусов, а при ненулевой температуре приобретает конечный декремент затухания.

Во **второй** главе изучено сильно коррелированное электронное состояние в одномерных квантовых точках. В качестве референсного подхода используется метод точной диагонализации, который позволяет учесть сильное электрон-электронное и спин-орбитальное взаимодействие без введения каких-либо модельных ограничений при их описании. С ним сопоставлены результаты аналитических подходов.

В разделе 2.2 рассмотрена проблема вигнеровского упорядочения, то есть сильных короткомасштабных корреляций, многоэлектронной системы в одномерной квантовой точке с нулевыми граничными условиями. Детально исследованы функция распределения электронов по одночастичным состояниям и фурье-спектр пространственного распределения электронной плотности. Найдено, что функция распределения содержит дельта-пик на фермиевском импульсе  $k_F$ , а фурье-спектр плотности обладает пороговой зависимостью от импульса со ступенькой на  $2k_F$ . Установлено, что эти особенности являются универсальными в широком диапазоне изменения параметров системы (длины, числа электронов, радиуса и амплитуды взаимодействия). Предложена аналитическая модель вигнеровского упорядочения, которая показала, что найденные особенности отражают формирование вигнеров-

ской молекулы в одномерной квантовой точке. Показано, что стандартная теория ограниченной латтинджеровой жидкости [45] неправильно описывает найденные закономерности, что связано с нарушением в этой теории полной электронной нейтральности системы. С помощью формализма, соблюдающего сохранение числа частиц, получен правильный гамильтониан системы и вычислены наблюдаемые, которые находятся в полном согласии с результатами точной диагонализации.

В разделе 2.3 изучены синглет-триплетные переходы в системе, состоящей из двух электронов в одномерной квантовой точке без разделяющего ее барьера. Показано, что синглет-триплетные переходы возникают благодаря совместному действию электрон-электронного отталкивания, спин-орбитального взаимодействия и магнитного поля. Наиболее интересный эффект связан с электрон-электронным взаимодействием, величину которого можно контролировать с помощью близлежащих затворов. Увеличение кулоновского взаимодействия приводит к существенному уменьшению критического магнитного поля, при котором осуществляется переход, и к уменьшению в спектре щели, возникающей при расталкивании уровней за счет спин-орбитального взаимодействия.

В разделе 2.4 показано, что вигнеровская молекула, формирующаяся в многоэлектронной системе в одномерной квантовой точке, не имеет спиновой текстуры в основном состоянии. Однако, под действием заряженного острия зондового микроскопа и в присутствии магнитного поля, которое может быть сколь угодно малым при достаточно сильном электрон-электронном взаимодействии, она приобретает спиновую структуру, которой можно эффективно управлять, перемещая зонд вдоль системы. Анализ пространственного распределения зарядовой и спиновой плотности выявил наличие областей положений зонда, в которых электронная система приобретает спиновую поляризацию в направлении внешнего магнитного поля. При расположении зонда вне этих зон спиновая поляризация отсутствует. В узкой переходной области между поляризованным и неполяризованным состоянием возникает спиновая поляризация, направленная вдоль квантового провода. Спин-поляризованное состояние возникает благодаря действию отрицательного потенциала зонда, разделяющего одномерную квантовую точку на две туннельно-

связанные квантовые ямы. В силу кулоновского отталкивания, электрон, занимающий более узкую квантовую яму со спином, параллельным магнитному полю, блокирует электроны с противоположным спином в соседней квантовой яме. Ширина поляризонных зон определяется величиной кулоновского отталкивания и магнитного поля. В переходных областях спиновая текстура определяется спин-орбитальным взаимодействием, порожденным электрическим полем заряженного острия.

**Третья** глава посвящена парному спин-орбитальному взаимодействию. Парным спин-орбитальным взаимодействием называют зависящую от спина и импульса электронов компоненту электрон-электронного взаимодействия, которая порождается кулоновскими полями взаимодействующих электронов. Оно становится существенным в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Фундаментальное свойство парного спин-орбитального взаимодействия состоит в том, что, помимо координат взаимодействующих электронов, оно определяется их импульсами и спинами, которые должны определяться самосогласованно из квантово-механических уравнений движения. Это свойство усложняет исследование, но взамен открывает широкие возможности для возникновения содержательно новых свойств взаимодействующей системы электронов.

Ключевой аспект парного спин-орбитального взаимодействия заключается в том, что оно создает притяжение между электронами в определенных спиновых конфигурациях, привязанных к импульсам. Притяжение есть следствие хорошо известного свойства спин-орбитального взаимодействия, которое опускает дно зоны проводимости в электронном спектре тем ниже, чем больше электрическое поле, его порождающее. Когда электроны приближаются друг к другу, возрастающее электрическое поле смещает зону проводимости вниз, что и приводит к уменьшению энергии электрона с определенной спиновой ориентацией, то есть к притяжению.

В разделе 3.2 приведен вывод гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия в кристаллах из гамильтониана Брейта-Паули в  $k \cdot p$  приближении. Показано, что в кристаллах магнитная компонента гамильтониана Брейта-Паули чрезвычайно мала по сравнению с электрической. В результате парное спин-орбитальное взаимодействие можно описать аналогично рашбовскому взаимодействию, порож-

денному кулоновскими полями взаимодействующих электронов. Приведены оценки для величины эффекта парного спин-орбитального взаимодействия и найдены требования к величине рашбовской константы материала, при которой эти эффекты становятся существенными. Показано, что этим требованиям отвечают тонкие слои  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{BiSb}$ , и другие.

Раздел 3.3 посвящен выводу формы гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия в конкретных низкоразмерных структурах в зависимости от конфигурации кулоновских полей в них. Рассмотрены различные актуальные наноструктуры: квантовые провода в системах с затвором, двумерные электронные системы в диэлектрически однородных структурах, свободно подвешенные двумерные слои, а также сэндвич-структуры на основе двумерных слоев, отделенных спейсером от металлического затвора. Особый интерес среди них представляют двумерные слои, поскольку слабое диэлектрическое экранирование в них увеличивает потенциал взаимодействия, а также приводит к существенному изменению его координатной зависимости, особенно на малых расстояниях между частицами. Это особенно важно в нашем случае, поскольку притяжение между электронами, обусловленное парным спин-орбитальным взаимодействием, наряду с величиной электрического поля определяется его координатной зависимостью.

Показано, что в одномерном квантовом проводе единственным источником парного спин-орбитального взаимодействия служит кулоновское поле электрон-электронного взаимодействия, направленное перпендикулярно проводу. Это поле создается зарядами изображения, индуцированными электронами на затворе. В двумерных системах, симметричных по отношению к инверсии нормальной координаты, парное спин-орбитальное взаимодействие порождается кулоновскими полями в плоскости системы. В двумерных системах с металлическим затвором парное спин-орбитальное взаимодействие создается благодаря совместному действию латерального и нормального полей.

В разделе 3.4 построена теория образования электронных пар, связанных притягивающим парным спин-орбитальным взаимодействием. Парное спин-орбитальное взаимодействие обеспечивает чисто электронный механизм спаривания. Его наи-

более интересный аспект состоит в том, что к спариванию приводит просто движение электронов в определенных спиновых конфигурациях, если величина спин-орбитального взаимодействия достаточно высока. Спиновая структура и спектр двухэлектронных связанных состояний в рассмотренных системах сильно отличаются друг от друга в силу различной конфигурации электрических полей, которые создают в них парное спин-орбитальное взаимодействие. Мы установили, что несмотря на эти отличия, связанные электронные пары можно расклассифицировать, исходя из природы движения, которое порождает притяжение электронов, на два принципиально разных типа. Благодаря относительному движению электронов в паре образуются *релятивные* состояния, спектр и структура которых не зависят от движения центра масс. *Конвективные* связанные состояния, возникающие вследствие движения пары как целого, напротив, образуются только при достаточно большом импульсе пары. Их спектр, орбитальная и спиновая структура существенно зависят от величины полного импульса. По нашим оценкам, энергия связи, достижимая в современных материалах с гигантским спин-орбитальным взаимодействием, составляет несколько мэВ, а ее величиной можно управлять чисто электрическими методами.

Неожиданный результат связан с суммарным эффектом латерального и нормального полей в двумерных слоях с затвором: в спектре возникает устойчивая связанная пара электронов, спиновая и зарядовая структура которой совершенно не зависят от напряжения на затворе. Энергия связи пары, отсчитанная от дна зоны проводимости, уменьшается при повышении напряжения на затворе, так что при достаточно большом напряжении уровень энергии попадает в непрерывную часть спектра зонных состояний. Однако, устойчивое состояние остается там связанным и локализованным, то есть в континуальном спектре возникает дельта-пик в плотности состояний, отвечающий дискретному уровню связанной электронной пары.

Также показано, что спин-орбитальное взаимодействие, создаваемое электрическими полями заряженных примесей, является эффективным механизмом образования связанных состояний. Механизм может быть реализован в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, больше некоторого критиче-

ского, при условии, что пространственное расположение примеси локально нарушает симметрию инверсии структуры в направлении, перпендикулярном к слою.

**Четвертая глава** посвящена проявлениям парного спин-орбитального взаимодействия в структуре многоэлектронного состояния в одномерных системах, а также в электронном транспорте в квантовых проводках. В ней рассматривается одномерная электронная система с расположенным вблизи нее металлическим затвором. Парное спин-орбитальное взаимодействие порождается электрическим полем зарядов изображения на затворе.

В разделе 4.1 показано, что в одномерной системе с фиксированным химическим потенциалом увеличение парного спин-орбитального взаимодействия приводит к возникновению двух ветвей решения для величины средней электронной плотности, на одной из которых решение неустойчиво и расходится при критическом значении константы взаимодействия, достижимом в современных материалах. Неустойчивость отражает качественно новое свойство парного спин-орбитального взаимодействия: существование положительной обратной связи между его величиной и плотностью электронов, которая и создает механизм роста флуктуации электронной плотности. Обнаруженная неустойчивость указывает на тенденцию к формированию нового коррелированного состояния.

В одномерной электронной системе парное спин-орбитальное взаимодействие вносит прежде неучтенный вклад в гамильтониан электрон-электронного взаимодействия, который становится зависящим от спина, и драматически перестраивает межэлектронные корреляции. Рассмотрены как сильно коррелированное электронное состояние (латтинджерова жидкость), так и слабо взаимодействующий ферми-газ в рамках приближения случайных фаз. В разделе 4.2 найден спектр коллективных возбуждений системы и показано, что парное спин-орбитальное взаимодействие в латтинджеровой жидкости нарушает спин-зарядовое разделение между коллективными модами, которые приобретают смешанную спин-зарядовую структуру. При этом одна из двух коллективных мод по мере увеличения амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия эволюционирует от чисто спинового к чисто зарядовому возбуждению, а ее скорость непрерывно уменьшается. Иными

словами, мода в длинноволновой части спектра системы смягчается. При критическом значении амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия скорость этой моды обращается в ноль вместе с зарядовой жесткостью системы, что указывает на неустойчивость системы в зарядовом секторе.

В разделе 4.3 решается проблема экспериментального исследования парного спин-орбитального взаимодействия по динамическим транспортным измерениям. Показано, что благодаря нарушению спин-зарядового разделения обе коллективные моды со смешанной спин-зарядовой структурой проявляются в электрических откликах, что открывает возможность для их изучения чисто электрическими методами. Разработана теория динамического токового отклика в одномерных системах с нарушенным спин-зарядовым разделением. Детально исследована частотная зависимость адмиттанса в квантовых проводах, соединенных с токоподводящими электродами. Динамический адмиттанс найден путем бозонизации гамильтониана и решения неоднородного уравнения движения на бозонную фазу с граничными условиями на контактах. Обнаружено, что действительная и мнимая части адмиттанса демонстрируют осциллирующую зависимость от частоты приложенного напряжения, которая отражает наличие резонансов Фабри-Перо на пролетных частотах для обеих мод. При достаточно сильном спин-орбитальном взаимодействии скорость одной из мод сильно падает и образуется хорошо выраженная структура двухпериодных осцилляций. Показано, что по резонансным частотам в адмиттансе можно определить скорости мод, их спин-зарядовую структуру, и, тем самым, величину парного спин-орбитального взаимодействия.

В разделе 4.4 изучен динамический токовый отклик электронов в одномерном квантовом проводе при бесконтактном возмущении электронной системы переменным электрическим полем от заряженного острия зондового микроскопа. В этой системе электроны управляются не тянущим электрическим полем, — оно отсутствует из-за экранирования со стороны близко расположенного затвора, — а нестационарным спин-орбитальным взаимодействием, создаваемым полем острия. Показано, что под его действием в системе возникает как спиновый, так и зарядовый ток. В токовый отклик существенный вклад вносит парное спин-орбитальное

взаимодействие, которое перемешивает зарядовые и спиновые возбуждения, созданные зондом. Скорость этих возбуждений за счет парного спин-орбитального взаимодействия сильно перенормируется, благодаря чему величиной отклика можно управлять, изменяя напряжение на затворе. При увеличении этого напряжения одна из мод смягчается, в результате чего возрастает токовый отклик и диссипируемая в системе мощность.

# Глава 1. Короткомасштабные корреляции электронов в одномерных системах

## 1.1 Введение

Эффекты электрон-электронного взаимодействия увеличиваются при уменьшении размерности электронной системы, поскольку при этом уменьшается область фазового пространства, доступная для электронных переходов в процессах электрон-электронного рассеяния. В одномерном случае имеется всего два канала рассеяния электронов, вперед и назад, из-за чего электроны всегда сталкиваются с определенными соседними частицами и совершают вместе с ними коллективное движение. В результате даже сколь угодно слабое взаимодействие приводит к образованию сильно коррелированного состояния, которое известно как латтинджерова жидкость [46—48]. Ее ключевые особенности состоят в следующем:

1. Распределение электронов по импульсам  $n(k)$  не испытывает скачка Мигдала [2] на фермиевском импульсе  $k_F$ , а является плавной степенной функцией импульса  $n(k) \sim |k - k_F|^\alpha$  с неуниверсальным (то есть зависящим от взаимодействия) показателем степени  $\alpha$ .
2. У одночастичной функции Грина нет полюсов, отвечающих фермионным квазичастицам.
3. Элементарные возбуждения системы имеют бозонный характер, причем существуют два независимых типа бозонных возбуждений, зарядовое и спиновое, между которыми соблюдается спин-зарядовое разделение.
4. В туннельной плотности состояний и спектральной функции на уровне химического потенциала есть мягкая щель.
5. Корреляционные функции заряда и спина спадают по степенному закону с неуниверсальным показателем степени.

6. Существуют сильные короткомасштабные корреляции на масштабе, кратном  $2k_F$ , описывающие ближний порядок в жидкостном состоянии.

В этой главе рассмотрена проблема короткомасштабных корреляций электронов в одномерной взаимодействующей системе. В одномерных системах короткомасштабные корреляции выражены значительно сильнее, чем в системах большей размерности  $D$ . Так, фриделевские осцилляции электронной плотности [49]

$$\langle \rho(x) \rangle \sim \frac{\cos(2k_F x)}{x^D} \quad (1.1)$$

при  $D > 1$  спадают с расстоянием быстрее, чем в случае одного измерения. Вдобавок, в одномерных системах электрон-электронное взаимодействие приводит к дополнительному увеличению их амплитуды:

$$\langle \rho(x) \rangle \sim \frac{\cos(2k_F x)}{x^g}, \quad (1.2)$$

где  $0 < g \leq 1$  есть параметр взаимодействия электронов [26], связанный с фурье-образом потенциала взаимодействия  $U_p$  как

$$g(p) = \left( 1 + \frac{U_p}{\pi \hbar v_F} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.3)$$

где  $v_F$  обозначает фермиевскую скорость.

Короткомасштабные корреляции не приводят к образованию дальнего порядка в идеальной одномерной системе даже в случае сильного взаимодействия, поскольку его возникновение запрещено теоремой Мермина-Вагнера [50]. Однако статические короткомасштабные корреляции проявляются при отклонении системы от идеальности: при пиннинге на примеси, в ограниченной одномерной системе (одномерной квантовой точке) и так далее. Проблема короткомасштабных корреляций в структуре основного состояния электронов в одномерной квантовой точке подробно рассмотрена в следующей главе. Здесь мы сосредоточимся на бесконечных одномерных системах, и попутно разработаем аппарат для описания короткомасштабных корреляций, который пригодится нам и далее.

В литературе короткомасштабные корреляции в бесконечных одномерных системах изучались преимущественно в связи с пиннингом латтинджеровой жидкости на примеси [51–56]. Основное внимание при этом уделялось распределению

электронной плотности вокруг примеси, то есть статическим короткомасштабным корреляциям. Вклад же короткомасштабных корреляций в электронный транспорт в латтинджеровой жидкости изучался лишь в контексте туннелирования через примесь [57–61].

Ключевая идея этой главы состоит в том, что раз короткомасштабные корреляции вносят вклад в плотность одномерной электронной системы, они должны давать вклад в динамический электронный транспорт и при отсутствии в системе примесей.

Отметим, что роль короткомасштабных корреляций в динамике электронной плотности обсуждалась в литературе довольно давно [62]. Известно, что игнорирование короткомасштабных корреляций в динамическом транспорте ведет к патологическим последствиям типа возникновения области отрицательных значений парной корреляционной функции плотности и нарушения правила сумм для сжимаемости [63], причем характерно, что с понижением размерности системы проблемы теории усугубляются. Однако учет короткомасштабных корреляции в динамическом транспорте проводился в литературе в основном в рамках приближения случайных фаз с разнообразными модификациями (метод Сингви-Тоси-Ланда-Сьоландера и др.) [64–66]. В этих методах короткомасштабные корреляции электронов учитываются лишь частично путем введения поправок на локальное поле. Между тем, было установлено, что в одномерных системах, где короткомасштабные корреляции выражены сильнее всего, такой подход приводит к серьезным проблемам для динамических корреляционных функций и спектра коллективных мод. Достаточно упомянуть, что в области плазмонных частот динамический структурный фактор оказывался отрицательным [67].

Латтинджерова модель позволяет последовательно учесть короткомасштабные корреляции в одномерном случае. Цель этой главы состоит в исследовании динамических короткомасштабных корреляций электронов в латтинджеровой жидкости и их проявлений в транспортных свойствах. Мы рассмотрим следующий круг вопросов:

- Вывод оператора плотности, корректно описывающего короткомасштабные корреляции.

- Динамическая зарядовая восприимчивость латтинджеровой жидкости в коротковолновой области.
- Проблема определения проводимости одномерного квантового провода.
- Спектр коллективных возбуждений латтинджеровой жидкости.

## 1.2 Проблема описания короткомасштабных корреляций: оператор плотности

Эффективный аналитический подход к описанию короткомасштабных корреляций основан на методе бозонизации [68; 69], который кратко изложен в Приложении А. Электронная плотность латтинджеровой жидкости в представлении бозонизации имеет вид

$$\rho(x) = -\frac{\partial_x \phi}{\pi} + \frac{k_F}{\pi} \cos(2k_F x - 2\phi), \quad (1.4)$$

где  $\phi$  — бозонная фаза, которая аналогична полю смещения в механике сплошной среды. Первое слагаемое в этой формуле описывает плавную компоненту плотности, связанную с рассеянием электронов вперед. Вторая компонента, быстро осциллирующая в пространстве, описывает короткомасштабные корреляции, связанные с рассеянием электронов назад. Своим происхождением она обязана нестингу поверхности Ферми: электрон в одномерной системе может изменить свой импульс на  $\delta q = 2k_F$ , не меняя энергии, например, испытав обратное рассеяние на соседней частице или примеси, либо под действием внешнего возмущения.

Первая же трудность, которая возникает при исследовании динамического транспорта в латтинджеровой жидкости, обусловленного короткомасштабными корреляциями, заключается в том, что оператор плотности латтинджеровой модели (1.4) не сохраняет число частиц в системе [70; 71].

Действительно, требование сохранения числа частиц в изолированной 1D системе, или полной электронейтральности, означает, что в любой конечный момент

времени  $t$  интеграл от флуктуации плотности по длине системы равен нулю,

$$\int_{-L/2}^{+L/2} dx \langle \rho(x,t) \rangle = 0. \quad (1.5)$$

Для плавной компоненты оператора плотности (1.4)  $\rho_{lw} = -\partial_x \phi / \pi$  это равенство справедливо, поскольку эта компонента представляет собой полный дифференциал, а на границах системы выполняются периодические условия Борна-Кармана:

$$\int_{-L/2}^{+L/2} dx \rho_{lw} = - \int_{-L/2}^{+L/2} dx \frac{1}{\pi} \partial_x \phi = -\frac{1}{\pi} \phi \Big|_{-L/2}^{+L/2} = 0. \quad (1.6)$$

Однако  $2k_F$ -компонента оператора плотности (1.4), которую мы обозначим  $\rho_{CDW}$ , не удовлетворяет требованию сохранения числа частиц, так как для нее вышеуказанный интеграл не обращается в ноль тождественно,

$$\int_{-L/2}^{+L/2} dx \rho_{CDW} = \int_{-L/2}^{+L/2} dx \frac{k_F}{\pi} \cos(2k_F x - 2\phi) \neq 0. \quad (1.7)$$

Требование сохранения числа частиц можно переформулировать в виде ограничения на поведение динамической зарядовой восприимчивости  $\chi_{q\omega}$  при  $q \rightarrow 0$ . Поскольку интеграл (1.5) равен фурье-компоненте  $\langle \rho \rangle_{q=0}$ , получаем для восприимчивости при  $\omega \neq 0$  [70]:

$$\chi_{q\omega} \xrightarrow{q \rightarrow 0} 0. \quad (1.8)$$

Соответственно, восприимчивость  $\chi_{CDW}$ , вычисленная с оператором плотности (1.4), тоже не обращается в ноль, когда  $q \rightarrow 0$ , как можно показать прямым вычислением [68].

Отметим, что условия (1.5) и (1.8) не означают, что внешний заряд (скажем, заряд примеси) не будет экранироваться электронами одномерной системы. Внешний потенциал перераспределяет электронную плотность вдоль квантового провода. При этом экранирующий заряд оказывается сосредоточен вблизи внешнего заряда, в то время как равный ему заряд противоположного знака перемещается к концам провода. Таким образом, полное число электронов в одномерной системе сохраняется, а система в целом остается электронейтральной. Экранирующий заряд определяется пределом восприимчивости  $\chi_{q\omega}$  при  $q \rightarrow 0$ , взятым при нулевой частоте  $\omega = 0$ . Этот предел, разумеется, нулю не равен.

Причина этого дефекта оператора плотности состоит в том, что при использовании приближенной локальной связи (A.9) между полевыми операторами электронов и хиральных фермионов не было проведено последовательного низкоэнергетического разложения. В результате оператор плотности (1.4) содержит вклад от глубоко лежащих позитронных состояний, которые искусственно вводятся в латтинджерской модели при линейаризации спектра электронов.

В литературе из эвристических соображений предлагались и другие формы оператора плотности латтинджерской жидкости. Так, в работе [72] был приведен весьма наглядный вывод оператора плотности через бозонную фазу, который исходил непосредственно из представления, учитывающего дискретность расположения частиц,

$$\rho(x) = \sum_i \delta(x - x_i). \quad (1.9)$$

Введем фазу  $\tilde{\phi}(x)$ , которая изменяется на  $\pi$  в месте расположения каждого электрона  $x = x_i$ . Тогда оператор плотности принимает вид

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial x} \left( \tilde{\phi} + \sum_{m \neq 0} \frac{e^{2im\tilde{\phi}}}{2im} \right). \quad (1.10)$$

Обратим внимание, что это выражение имеет вид полного дифференциала. Тем самым сохранение числа частиц в системе гарантировано в силу периодических граничных условий.

В случае системы с периодическими граничными условиями, из уравнения (1.4) следует, что  $\tilde{\phi}(x) = k_F x - \phi(x)$ . Тогда первый член в формуле (1.10) совпадает с плавной компонентой оператора плотности (1.4). Гармоника  $m = \pm 1$  соответствует  $2k_F$ -компоненте оператора (1.4). Отличие между ними состоит в слагаемом более высокого порядка по степени малости энергии возмущения  $\propto \frac{\partial_x \phi}{k_F} \cos(2k_F x - 2\phi)$ , которое нивелирует отклик позитронного моря и обеспечивает тем самым соблюдение полной электронейтральности.

К сожалению, оператор (1.10) приводит к количественно неправильному описанию вклада короткомасштабных корреляций в отклики. Так, короткомасштабный отклик плотности  $\langle \rho_{\text{CDW}} \rangle$ , рассчитанный с оператором (1.10), в пределе невзаимодействующих электронов оказывается завышенным в 4 раза. Имея в виду модельный

характер оператора плотности (1.4), модифицируем его так, чтобы соблюдалась электронейтральность, и вместе с ней выполнялся правильный предельный переход к невзаимодействующим электронам [70]:

$$\rho_{\text{CDW}} = \frac{k_F}{\pi} \left(1 - \frac{\partial_x \phi}{k_F}\right) \cos(2k_F x - 2\phi) = \frac{1}{2\pi} \partial_x \sin(2k_F x - 2\phi). \quad (1.11)$$

Это и есть искомый результат.

С помощью изложенного выше подхода найдем также оператор плотности в одномерной квантовой точке с нулевыми граничными условиями. Из формулы (A.36) следует, что фаза  $\tilde{\phi}$ , которая меняется на  $\pi$  при прохождении каждого электрона, равна

$$\tilde{\phi}(x) = k_F x - \varphi(x) - f(x), \quad (1.12)$$

где  $\varphi(x)$  есть бозонная фаза в конечной системе, а  $f(x)$  есть дополнительная фаза, связанная с наличием у системы границ. Тогда оператор плотности (1.10) принимает вид [71]

$$\rho(x) = \frac{k_F}{\pi} - \frac{\partial_x \varphi}{\pi} - \frac{\partial_x f}{\pi} - \left( \frac{k_F}{\pi} - \frac{\partial_x \varphi}{\pi} - \frac{\partial_x f}{\pi} \right) \cos(2k_F x - 2\varphi(x) - 2f(x)), \quad (1.13)$$

где удержаны лишь гармоники с  $m = 0, \pm 1$ , а амплитуда  $2k_F$ -компоненты определяется по предельному переходу к невзаимодействующим частицам. Мы воспользуемся этим оператором в следующей главе для описания электронных корреляций в одномерной квантовой точке.

### 1.3 Динамическая восприимчивость латтинджеровой жидкости

В этой секции мы исследуем динамический отклик плотности латтинджеровой жидкости, который потребуется нам дальше для определения ее проводимости и спектра коллективных возбуждений. Для этого будет использован полученный нами оператор плотности (1.11).

Кубовский зарядовый отклик латтинджеровой жидкости

$$\chi(x,t) = \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle [\rho(x,t), \rho(0,0)] \rangle, \quad (1.14)$$

как и оператор плотности, содержит две компоненты:

$$\chi(x,t) = \chi_{lw}(x,t) + \chi_{CDW}(x,t). \quad (1.15)$$

Функция

$$\chi_{lw}(x,t) = i \frac{\theta(t)}{\pi^2 \hbar} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle [\phi(x,t), \phi(0,0)] \rangle \quad (1.16)$$

описывает длинноволновую компоненту отклика, а функция

$$\chi_{CDW}(x,t) = \frac{\theta(t)}{i2\pi\hbar} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle [\sin(2k_F x - 2\phi(x,t)), \sin(2\phi(0,0))] \rangle \quad (1.17)$$

описывает отклик, обусловленный короткомасштабными корреляциями. Перекрестные члены, содержащие  $\rho_{CDW}\rho_{lw}$ , как показывает непосредственное вычисление, зануляются в термодинамическом пределе [26].

Обе функции отклика точно вычисляются для короткодействующего электрон-электронного взаимодействия. В этом случае закон дисперсии бозонных возбуждений  $\omega_p = v|p|$  линеен, а скорость зарядовых возбуждений перенормирована взаимодействием согласно  $v = v_F/g$ . Тогда [70; 73]

$$\chi_{lw}(x,t) = g \frac{\theta(t)}{\hbar} \partial_x [\delta(vt + x) - \delta(vt - x)]. \quad (1.18)$$

Длинноволновая компонента функции отклика не зависит от температуры. Интеграл от функции отклика (1.18) по длине системы равен нулю, что отражает сохранение числа частиц в системе.

Короткомасштабная часть зарядового отклика при конечной температуре  $T$  дается формулой [74]

$$\chi_{CDW}(x,t) = \frac{\theta(t)}{4\pi^2 \hbar} \left( \frac{\pi\alpha}{l} \right)^{2g} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{\sin(\pi g)\theta(v^2 t^2 - x^2)}{[\sinh \frac{\pi}{l}(vt - x)]^g [\sinh \frac{\pi}{l}(vt + x)]^g} \cos(2k_F x) \right], \quad (1.19)$$

где  $l = \hbar v_F/gT$  есть температурная длина. При конечной температуре амплитуда функции отклика убывает со временем и с координатой экспоненциально, причем  $l$  играет роль корреляционной длины.

Корреляции электронов увеличиваются с понижением температуры. При  $T \rightarrow 0$  корреляционная длина стремится к бесконечности. При нулевой температуре [70]

$$\chi_{\text{CDW}}(x,t) = \theta(t) \frac{\alpha^{2g}}{4\pi^2 \hbar} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{\sin(\pi g) \theta(v^2 t^2 - x^2)}{(v^2 t^2 - x^2)^g} \cos(2k_F x) \right]. \quad (1.20)$$

Корреляционные функции латтинджерской жидкости с короткодействующим электрон-электронным взаимодействием описываются при  $T = 0$  степенными зависимостями от координаты и времени, причем критические экспоненты оказываются неуниверсальными.

При всяком фиксированном  $t$ , интеграл от функции отклика  $\chi_{\text{CDW}}(x,t)$  по длине системы равен нулю благодаря наличию в выражении (1.19) второй производной  $\partial^2/\partial x^2$ . Это обстоятельство отражает сохранение полного числа частиц в системе. Функция отклика, вычисленная с обычным оператором плотности (1.4), отличается от (1.19) именно отсутствием второй производной, и нарушает требование электронейтральности.

Обратимся к анализу зарядовой восприимчивости, то есть фурье-преобразованию функции отклика плотности. Ее длинноволновая компонента [26]

$$\chi_{1w}(q,\omega) = \frac{2v_F}{h} \frac{q^2}{(\omega + i0)^2 - \omega^2(q)} \quad (1.21)$$

удовлетворяет требованию электронейтральности, поскольку предел

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{1w}(q,\omega) = 0 \quad (1.22)$$

равен нулю для любой частоты  $\omega \neq 0$ .

Короткомасштабная компонента зарядовой восприимчивости в случае короткодействующего взаимодействия равна [70]

$$\chi_{\text{CDW}}(q,\omega) = -\frac{1}{\hbar v_F} \frac{g}{4^{g+1} \Gamma^2(g) \sin(\pi g)} \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \sum_{r=\pm 1} \left[ \left(\frac{q}{k_F} - 2r\right)^2 - \left(g \frac{\hbar\omega + i0}{k_F v_F}\right)^2 \right]^{g-1}. \quad (1.23)$$

Ее мнимая часть  $\chi''_{\text{CDW}}(q,\omega)$ , которая определяет поглощаемую в системе мощность, отлична от нуля лишь внутри полосы диссипации  $||q| - 2k_F| < g\omega/v_F$ , а вне ее исчезает. Для свободных электронов ( $g = 1$ ) внутри этой полосы диссипативная

восприимчивость есть плавная функция  $q$ . Включение электрон-электронного взаимодействия качественно изменяет ее форму. На краях полосы, т.е. при  $|q| = 2k_F \pm g\omega/v_F$ ,  $\chi''_{\text{CDW}}(q, \omega)$  расходится по степенному закону, причем степень определяется параметром межэлектронного взаимодействия. Эта расходимость есть динамический аналог коновской аномалии. При усилении взаимодействия диссипативная восприимчивость увеличивается.

Напротив, действительная часть восприимчивости  $\chi'_{\text{CDW}}(q, \omega)$  отлична от нуля во всем диапазоне изменения  $q$ . При  $q \rightarrow 0$  восприимчивость  $\chi'_{\text{CDW}}(q, \omega) \rightarrow 0$  стремится к нулю из-за наличия множителя  $q^2$ . Этот множитель обязан своим происхождением тому обстоятельству, что оператор плотности (1.11) имеет вид полного дифференциала. Восприимчивость, вычисленная со стандартным оператором плотности Латтинджерской модели (1.4), отличается от формулы (1.23) именно отсутствием множителя  $q^2$ , гарантирующего соблюдение электронейтральности.

Зависимость  $\chi_{\text{CDW}}(q, \omega) \sim q^2$  имеет место также для  $\omega = 0$ . Таким образом, выбор оператора плотности в виде (1.11) не только гарантирует сохранение полного числа частиц в системе, но также приводит к важному выводу, что короткомасштабные корреляции не вносят вклад в экранирующий заряд [70]. Формула (1.23) обеспечивает правильный предельный переход к случаю невзаимодействующих электронов ( $g = 1$ ), ответ для которого дается формулой Линдхарда [64].

Формула (1.23) показывает, что короткомасштабная компонента зарядовой восприимчивости расходится на границах полосы диссипации  $||q| - 2k_F| < g\omega/v_F$ . Подчеркнем, что расходимость восприимчивости очень важна, поскольку она соответствует существованию в системе коллективной моды. Поэтому представляет значительный интерес проследить, как влияют на расходимость восприимчивости различные внешние факторы, например, температура.

Для случая конечной температуры  $T$  короткомасштабная компонента диссипативной восприимчивости дается формулой [74]

$$\chi''_{\text{CDW}}(q, \omega) = \frac{q^2}{32\pi^2\hbar} (e^{-\frac{\hbar\omega}{T}} - 1) [X(q - 2k_F, \omega) + X(q + 2k_F, \omega)] , \quad (1.24)$$

причем вспомогательная функция  $X$  равна

$$X(q, \omega) = A(q, \omega) [\cos(\pi g) - \cosh(\pi \omega_-)]^{-1} [\cos(\pi g) - \cosh(\pi \omega_+)]^{-1}, \quad (1.25)$$

где  $A(q, \omega)$  есть несингулярная функция частоты и волнового вектора,

$$A(q, \omega) = \frac{2^g \pi^2}{8v} l^2 \left(\frac{\pi \alpha}{l}\right)^{2g} e^{\frac{\pi \omega l}{2v}} \Gamma^{-2}(g) \left| \Gamma\left(1 - \frac{g}{2} - \frac{i\omega_-}{2}\right) \right|^{-2} \left| \Gamma\left(1 - \frac{g}{2} - \frac{i\omega_+}{2}\right) \right|^{-2}, \quad (1.26)$$

и введено обозначение

$$\omega_{\pm} = \frac{l}{2} \left( \frac{\omega}{v} \pm q \right). \quad (1.27)$$

Вся сингулярная часть  $\chi''_{\text{CDW}}(q, \omega)$  содержится в множителях в квадратных скобках в формуле (1.25). Функция  $\chi''_{\text{CDW}}(q, \omega)$  имеет простые полюсы при  $\omega_{\pm} = \pm ig + 2in$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ . Это соответствует особенностям зарядовой восприимчивости при  $\|q\| - 2k_F = \omega/v \pm 2igT/v$ . Таким образом, температура сглаживает сингулярности  $\chi_{\text{CDW}}(q, \omega)$ . При конечной температуре вблизи краев зоны диссипации короткомасштабная часть зарядовой восприимчивости описывается лоренцевой кривой с шириной  $\gamma = 2gT$ .

## 1.4 Неинвазивные транспортные измерения: диссипативная проводимость

В настоящее время наблюдается значительный всплеск интереса в баллистическому электронному транспорту в квантовых проводках [75–79]. Динамические транспортные измерения представляют собой наиболее тонкие и точные методы исследования квантового многочастичного состояния [80]. Конкретно, анализ частотной зависимости проводимости — мощный инструмент для изучения эффектов электрон-электронного взаимодействия в одномерных системах. Действительные и мнимые части динамического кондактанса [44; 81; 82], и, особенно, баллистические резонансы адмиттанса [83; 84] позволяют определить параметры взаимодействия

латтинджеровой жидкости. В последние годы эта техника получила существенное развитие и была с успехом применена к изучению электронной жидкости в углеродных нанотрубках в терагерцовом диапазоне [85—87].

Цель этого раздела состоит в исследовании динамической проводимости латтинджеровой жидкости, обусловленной короткомасштабными корреляциями электронов. Здесь возникает принципиальный вопрос о схеме измерения проводимости. Известно, что в проводимости квантовых проводов критическую роль играют токоподводящие электроды [10]. Для изолированного изучения свойств коррелированного электронного состояния, не связанных с влиянием контактов, требуется неинвазивный способ определения проводимости.

Поиск неинвазивных методов возбуждения электронной системы и измерения ее откликов представляет собой сегодня одну из наиболее горячих тем, особенно, в плазмонике. Для этих целей широко применяются наноантенны и различные зондовые методы [88], и даже кельвиновская силовая микроскопия [89].

Мы рассматриваем модель, в которой одномодовый квантовый провод находится под действием переменного электрического поля, созданного проводящим типом сканирующего зондового микроскопа. Подобная схема рассматривалась в работе [81] в контексте локального возмущения зарядовой подсистемы в квантовом проводе. Измеряемой величиной здесь служит диссипируемая в системе мощность, которая, в принципе, может быть определена с помощью термозондовой микроскопии [90]. Неожиданный результат состоит в том, что в низкочастотном пределе вклад короткомасштабных корреляций в диссипативную проводимость оказывается ведущим по сравнению со вкладом длинноволновых корреляций.

Обозначим потенциал зонда  $\varphi_{\text{ext}}(x,t) = \varphi(x) \cos(\omega t)$ . Тогда диссипируемая в проводе мощность равна [44]

$$P = e^2 \int_0^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} |\varphi(q)|^2 [-\omega \chi''(\omega, q)]. \quad (1.28)$$

Длинноволновая компонента электронной плотности, в соответствии с уравнением (1.21), приводит к следующему вкладу в поглощаемую мощность:

$$P_{\text{lw}} = g \frac{e^2}{2h} \frac{\omega^2}{v^2} |\varphi(\omega/v)|^2. \quad (1.29)$$

Вклад короткомасштабных корреляций в поглощаемую мощность, в соответствии с формулой (1.23) для CDW компоненты восприимчивости, равен [70; 91]

$$P_{\text{CDW}} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\Gamma(1/2)}{4g\Gamma(g)\Gamma(g+1/2)} \left( \frac{\omega}{vk_F} \right)^{2g} k_F^2 |\varphi(2k_F)|^2. \quad (1.30)$$

Отношение мощностей, диссипируемых за счет длинноволновой и CDW компонент плотности, равно

$$\frac{P_{\text{CDW}}}{P_{\text{lw}}} \sim \left( \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_F} \right)^{2g-2} \left| \frac{\varphi(2k_F)}{\varphi(\omega/v)} \right|^2. \quad (1.31)$$

Поскольку параметр взаимодействия  $g < 1$ , это выражение расходится в низкочастотном пределе. Этот результат означает, что диссипативная проводимость латтинджеровой жидкости определяется короткомасштабными корреляциями электронов, а не длинноволновой компонентой электронной плотности, как это обычно считалось.

Эти результаты получены для короткодействующего межэлектронного взаимодействия. В случае неэкранированного кулоновского взаимодействия между электронами мнимая часть восприимчивости расходится вблизи края полосы диссипации еще сильнее [92; 93]:

$$\chi''_{\text{CDW}}(q, \omega) \sim \frac{e^{-4\beta|\ln \varepsilon|^{1/2}}}{\omega \varepsilon |\ln \varepsilon|^{1/2}}, \quad (1.32)$$

где обозначено  $\varepsilon = \omega - \omega_{q-2k_F}$  и  $\beta = [\pi\hbar v_F/2e^2]^{1/2}$ . Расходимость в кулоновском случае близка к  $\sim 1/\varepsilon$ , но при этом является интегрируемой. Соответственно, эффект короткомасштабных корреляций в проводимости кулоновской латтинджеровой жидкости больше, чем в случае короткодействия. Мощность, поглощаемая в кулоновской латтинджеровой жидкости при локальном возбуждении, равна

$$P_{\text{CDW}}(\omega) \sim \frac{e^{-4\beta|\ln \omega|^{1/2}}}{|\ln \omega|^{1/2}} |\varphi(2k_F)|^2. \quad (1.33)$$

Анализ выше справедлив для низкой температуры  $T < \hbar\omega$ . Используя формулы (1.24)–(1.26), получаем, что при температуре  $T > \hbar\omega$  зависимость  $P_{\text{CDW}}$  от  $\omega$  становится линейной, а мощность  $P_{\text{lw}} \sim \omega^2$  от температуры не зависит. Таким образом,

при любой температуре  $T$  доминирующий вклад в низкочастотную проводимость латтинджеровой жидкости при локальном возбуждении дают короткомасштабные корреляции.

## 1.5 Мягкая мода в спектре коллективных возбуждений

В завершение этой главы изучим вопрос об эффекте короткомасштабных корреляций в спектре коллективных возбуждений в одномерной электронной системе. Применительно к двумерным и трехмерным системам такой вопрос вообще лишен смысла, потому что в них коллективная мода не определена в коротковолновой области из-за затухания Ландау [3; 4; 64]. Как только частота моды попадает в область существования парных электрон-дырочных возбуждений, мода распадается, так что зарядовые возбуждения в этих системах существуют лишь в длинноволновой области.

Специфика одномерного случая заключается в том, что в области парных возбуждений возникает щель [69], так что в окрестности волновых векторов  $q \approx 2k_F$  становятся возможными возбуждения с энергией в этой щели, не попадающие в область электрон-дырочных пар. Более того, как видно из уравнений (1.23) и (1.32), в одномерной электронной системе область диссипации вовсе не совпадает с областью парных возбуждений, а, вообще говоря, уже ее. Область диссипации и область парных возбуждений в одномерной электронной системе показаны на Рис. 1.1. Поскольку короткомасштабные корреляции дают расходящийся вклад в восприимчивость заряда одномерной системы, есть все основания ожидать сильных особенностей и в коротковолновой части спектра коллективных возбуждений.

Спектр зарядовых возбуждений определяется из нулей диэлектрической функции  $\epsilon(q, \omega)$  или, что то же самое, из расходимостей зарядовой восприимчивости  $\chi(q, \omega)$ , которые связаны между собой соотношением [3; 4; 64]

$$\epsilon^{-1}(q, \omega) = 1 + U(q)\chi(q, \omega). \quad (1.34)$$

где  $U(q)$  — гармоника потенциала межэлектронного взаимодействия.

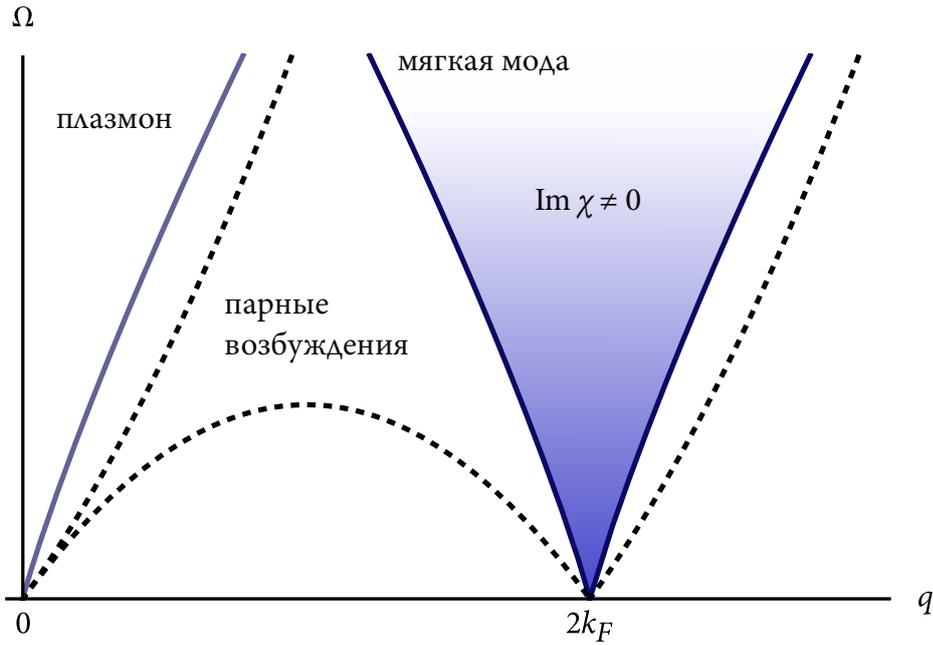


Рисунок 1.1 — Дисперсионные кривые коллективных мод в бесспиновой латтинджеровой жидкости показаны сплошными линиями. В длинноволновой части спектра существуют плазмоны. Кроме этого, в окрестности  $q \approx 2k_F$  существует мягкая коллективная зарядовая мода с дисперсией  $\Omega(q) = \omega_{|q|-2k_F}$ . Область парных возбуждений ограничена пунктиром, а область диссипации в латтинджеровой жидкости выделена заливкой.

Расходимость зарядовой восприимчивости (1.21) в длинноволновой области при  $\omega = \omega_q$  отвечает обычному плазмону. В коротковолновой области  $q \approx 2k_F$  зарядовая восприимчивость расходится при  $\omega = \omega_{|q|-2k_F}$  как для короткодействующего взаимодействия (уравнение (1.23)), так и для кулоновского электрон-электронного взаимодействия (уравнение (1.32)). Эта расходимость влечет существование новой зарядовой моды с дисперсией  $\Omega(q) = \omega_{|q|-2k_F}$  [74; 92; 94; 95]. При нулевой температуре частота моды является чисто действительной, то есть мода является незатухающей. Линия дисперсии  $2k_F$ -моды проходит по границе области диссипации, в которой мнимая часть восприимчивости отлична от нуля  $\chi''_{CDW}(q, \omega) \neq 0$ . Область диссипации в латтинджеровой жидкости уже, чем область существования парных возбуждений, благодаря увеличению скорости элементарных возбуждений за счет отталкивающего взаимодействия электронов. Частота моды обращается в ноль при  $q = 2k_F$ , то есть новая мода в коротковолновой области является мягкой. Подчеркнем, что основное

состояние системы остается однородным, как это и должно быть в одномерии. В отличие от длинноволнового плазмона,  $2k_F$ -мода является когерентным многобозонным возбуждением. Спектр коллективных мод бесспиновой латтинджеровой жидкости изображен на Рис. 1.1.

Возникновение мягкой  $2k_F$ -моды обусловлено короткомасштабными корреляциями электронов. В двумерных и трехмерных системах такой моды нет, поскольку короткомасштабные корреляции выражены в них значительно слабее [64; 96; 97]. Отметим, что  $2k_F$ -мода теряется в рамках подходов, основанных на RPA, в том числе и с разнообразными поправками на локальное поле, поскольку в них игнорируется динамический характер короткомасштабных корреляций [63; 65; 66; 98–101].

При конечной температуре  $T$  зарядовая восприимчивость (1.25) расходится при  $||q| - 2k_F| = \omega/v + 2igT/v$ . Следовательно, мода приобретает декремент затухания  $\gamma = 2gT$ . Декремент не зависит от волнового вектора  $q$ , поэтому при  $q \rightarrow 2k_F$  он становится сравнимым с частотой моды, которая обращается в нуль. Однако при смещении от точки  $q = 2k_F$  мода становится хорошо определенной. Заметим, что для достаточно сильного взаимодействия, когда  $g \rightarrow 0$ , ширина области, в которой мода сильно затухает, оказывается малой. Вне этой области коллективная мода распространяется свободно [74].

## 1.6 Заключение

В этой главе изучались короткомасштабные корреляции электронов в одномерных системах и их проявления в динамическом транспорте. Было установлено, что оператор плотности латтинджеровой модели не сохраняет число частиц в системе. Найдены лишние этого недостатка выражения для оператора плотности, справедливые для идеальной одномерной системы и для одномерной квантовой точки. С использованием корректного оператора плотности вычислена и проанализирована динамическая зарядовая восприимчивость латтинджеровой жидкости.

Показано, что в динамическую проводимость латтинджеровой жидкости дают вклад как длинноволновые, так и короткомасштабные корреляции электронов. Эффект короткомасштабных корреляций в проводимости существен и сильно зависит от величины межэлектронного взаимодействия. Установлено, что динамическая диссипативная проводимость квантового провода при локальном возмущении определяется в низкочастотном пределе короткомасштабными корреляциями электронов, а не длинноволновыми корреляциями, как это обычно считалось. Показано, что короткомасштабные корреляции электронов приводят к качественно новому поведению коллективной зарядовой моды в одномерной электронной жидкости. В области  $q \approx 2k_F$  частота моды уменьшается до нуля. Иными словами, благодаря короткомасштабным корреляциям в системе возникает мягкая мода в отсутствие электрон-фононного взаимодействия. Мягкая мода является незатухающей при нуле градусов, а при конечной температуре приобретает декремент затухания  $\gamma = 2gT$ .

## Глава 2. Коррелированное электронное состояние в одномерных квантовых точках

### 2.1 Введение

Одномерные квантовые точки привлекают большое внимание как удобные модельные объекты для изучения эффектов электрон-электронного взаимодействия, принципиально важного в одномерных электронных системах [13; 14; 102]. Возможности исследования многоэлектронного состояния в ограниченных одномерных системах значительно выросли в последнее время благодаря развитию магнитотуннельной спектроскопии таких структур [80; 103; 104]. В результате электрон-электронного взаимодействия в одномерных системах возникает латтинджерова жидкость, ключевые свойства которой — это отсутствие фермионных квазичастиц, неуниверсальная степенная зависимость корреляционных функций и сильные короткомасштабные (вигнеровские) корреляции электронов [26–28].

Эти свойства были установлены для идеальной, то есть неограниченной одномерной системы. Однако, принципиально важен вопрос о том, присущи ли они электронной системе конечной длины в реальной мезоскопической структуре. Дело в том, что наличие у системы границ может сильно повлиять на электронное состояние и возбуждения над ним, коль скоро корреляционные функции в одномерии убывают с расстоянием по степенному закону, то есть без характерной длины. В самом деле, многие наблюдения, относящиеся к мезоскопическим структурам, включающим конечную одномерную систему, не подтверждают теоретических предсказаний, сделанных для идеальных одномерных систем. Назовем в этой связи обусловленную взаимодействием перенормировку проводимости в бесконечной одномерной системе [58], которая в действительности не наблюдается из-за контактов [83; 105; 106], спиновую поляризацию [107; 108], которая не должна возникать

в силу теоремы Либа-Маттиса, '0.7' аномалию, разнообразные примеры неуниверсального квантования проводимости, которые не объясняются существующими теориями [109—111], и так далее [10].

В литературе считалось, что сильно коррелированное состояние, которое электроны формируют в ограниченных одномерных системах, можно описывать как ограниченную латтинджерову жидкость. Эффекты, обусловленные границами, исчерпываются в ней изменением электронных корреляций вблизи краев системы, которое можно описать введением дополнительных граничных экспонент. Такое заключение было сделано в нескольких теоретических работах, опирающихся на метод бозонизации [45; 112; 113]. К сожалению, этот подход основан на целом ряде не слишком хорошо обоснованных модельных допущений. Это, в частности, линеаризация электронного спектра, которая может приводить к существенному отклонению от свойств реальных систем с квадратичной дисперсией [114], и продление линеаризованного спектра до бесконечности в область отрицательных энергий, что приводит к нарушению законов сохранения [70; 115].

Цель настоящей главы — исследовать свойства сильно коррелированного электронного состояния в одномерных квантовых точках за пределами модельных допущений и найти для них адекватное аналитическое описание. В качестве референсного подхода мы выбрали метод точной диагонализации, который даже для сильного взаимодействия позволяет численно точно найти многоэлектронную волновую функцию и все наблюдаемые, такие как энергетический спектр, распределение электронов по одночастичным состояниям, пространственное распределение зарядовой и спиновой плотности, всевозможные корреляционные функции, и так далее.

Мы начнем с рассмотрения в разделе 2.2 многоэлектронного состояния в одномерной квантовой точке в бесспиновом случае. Мы показали, что в функции распределения электронов по одночастичным состояниям и в структуре пространственного распределения зарядовой плотности есть две неожиданные особенности, которые отражают короткомасштабные электронные корреляции или, иными словами, вигнеровское упорядочение электронов. А именно, функция распределения по

одночастичным состояниям содержит  $\delta$ -образный пик на фермиевском импульсе  $q = k_F$  на фоне плавной зависимости от  $q$ . Фурье-спектр плотности имеет особенность в виде ступеньки на удвоенном фермиевском импульсе  $2k_F$ , так что Фурье-гармоники с волновым вектором больше этой величины отсутствуют или исчезающе малы. Эти свойства являются универсальными в том смысле, что они не зависят от величины электрон-электронного взаимодействия, радиуса взаимодействия, длины квантовой точки, или средней электронной плотности. Результаты точной диагонализации сопоставлены с известными из литературы расчетами в рамках теории ограниченной латтинджерской жидкости. Оказалось, что эта теория также приводит к сингулярностям функции распределения и Фурье-спектра плотности, но их форма неправильная. С помощью простой модели выяснено, что найденные методом точной диагонализации особенности связаны с формированием в одномерной квантовой точке вигнеровской молекулы и ее деформацией за счет границ, а ошибка в модели латтинджерской жидкости обусловлена тем, что в ней нарушается полная нейтральность системы, вследствие чего деформация оказывается переоцененной. Найден подход, позволяющий в рамках метода бозонизации правильно описать коррелированное состояние. Он основан на использовании исправленного выражения для бозонизованного оператора плотности, который не нарушает сохранения полного числа частиц и электронейтральности системы.

Далее мы обратимся к изучению спиновых эффектов в одномерных квантовых точках в условиях сильного электрон-электронного взаимодействия. Проблема управления спином электронов в квантовых наноструктурах — это многообещающая задача, которая в настоящее время привлекает пристальное внимание ввиду возможных приложений в спинтронике и квантовых вычислениях и создает широкий фронт физических исследований [14; 37; 116–121]. Одно из наиболее перспективных направлений поиска эффективных механизмов управления спином основано на изучении спиновой динамики в присутствии спин-орбитального взаимодействия и магнитного поля [33]. На спиновые степени свободы в низкоразмерных квантовых структурах также сильно влияет электрон-электронное взаимодействие,

однако эффекты совместного действия спин-орбитального и электрон-электронного взаимодействия в литературе до сих пор слабо изучены.

Эффективное управление спином достигается в присутствии магнитного поля в системе двойных квантовых точек, разделенных потенциальным барьером, за счет модуляции высоты барьера [122; 123]. Важным параметром переключения спиновых состояний служит энергетическая щель между ними, которая определяет точность их инициализации и считывания. Механизм управления спином в двойных квантовых точках основан на синглет-триплетных переходах. Для этого механизма точность определяется величиной спин-орбитального взаимодействия, которая задает расщепление синглетных и триплетных уровней  $\Delta_{SOI}$ . Поскольку спин-орбитальное взаимодействие в полупроводниковых квантовых проводах обычно не слишком велико, такое расщепление оказывается небольшим, следовательно, актуальным является поиск механизмов, увеличивающих щель.

Обычно синглет-триплетные переходы вызываются внешним магнитным полем [124–127], хотя недавно было показано, что в топологически нетривиальных системах возможны переходы и в его отсутствие [128]. Значение критического магнитного поля  $B_c$ , при котором возникает пересечение синглетных и триплетных термов, весьма высоко. Вдобавок, магнитное поле плохо приспособлено для локального воздействия на спин. Поэтому важно исследовать физические механизмы, позволяющие уменьшить критическое значение магнитного поля и допускающие возможность локального воздействия на спин чисто электрическим путем. Методы манипуляции спиновыми состояниями, использующие сдвиг уровней размерного квантования в квантовых точках под действием внешнего электрического поля, изучались в работах [129–131].

В разделе 2.3 мы покажем, что существует эффективный метод управления спиновым состоянием в электростатически сформированных квантовых точках, основанный на модуляции величины электрон-электронного взаимодействия. Такая модуляция создается изменением потенциалов близлежащих затворов, которые определяют размер области локализации электронов. Например, в случае одномерного квантового провода диаметра  $d$  потенциал взаимодействия хорошо аппроксимиру-

ется формулой [132]  $V(x_1, x_2) \approx e^2 / \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + d^2}$ . В одномерной квантовой точке оценка энергии взаимодействия дает  $V \sim (2e^2/L) \ln |L/d|$ . Отсюда видно, что, сжимая одномерную точку в поперечном направлении, мы увеличиваем  $V$ . Роль электрон-электронного взаимодействия в синглет-триплетных переходах в квантовых точках подчеркивалась в работах [131; 133], но управление синглет-триплетными переходами путем модуляции парного взаимодействия не обсуждалось, и определяющие синглет-триплетный переход параметры (такие как критическое магнитное поле  $B_c$  и щель в энергетическом спектре в окрестности анти-кроссинга уровней) не были изучены.

В последние годы все большее внимание уделяется методам, использующим острие сканирующего зондового микроскопа для изучения электронной подсистемы в низкоразмерных квантовых структурах и для управления электронным состоянием [134–141]. Управление электронами оказывается особенно эффективным в одномерных квантовых точках, которые разделяются отрицательным потенциалом заряженного зонда на две квантовые ямы [142]. В этих условиях электрон-электронное взаимодействие в значительной мере определяет перераспределение электронной плотности между ямами. Благодаря электрон-электронному взаимодействию, острие СЗМ, движущееся над одномерной квантовой точкой, вынуждает электроны переходить по одному из одной ямы в другую. В пренебрежении электронным спином, этот вопрос изучался Гальпериним с соавторами [142].

В разделе 2.4 показано, что спином электронов в квантовых точках можно управлять при помощи заряженного зонда, если в системе присутствует внешнее магнитное поле. Преимуществом такого механизма спиновой манипуляции является легкость в подстройке параметров системы, а именно расщепления уровней энергии и коэффициента туннелирования между ямами. Величиной спин-орбитального взаимодействия также можно управлять, поскольку существенный вклад в него обусловлен электрическим полем зонда, которое становится весьма значительным при приближении зонда к одномерной квантовой точке.

## 2.2 Деформированный вигнеровский кристалл в одномерной квантовой точке

### 2.2.1 Гамильтониан одномерной квантовой точки

Рассмотрим  $N$  бесспиновых электронов в одномерной квантовой точке с нулевыми граничными условиями для многоэлектронной волновой функции,

$$\Psi|_{x=0} = \Psi|_{x=L} = 0. \quad (2.1)$$

Гамильтониан системы равен

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i>j} V(x_i - x_j) + \sum_i U(x_i), \quad (2.2)$$

где  $V(x)$  есть потенциал электрон-электронного взаимодействия, а  $U(x)$  есть потенциал положительно заряженного фона, который рассматривается как желе.

Метод точной диагонализации состоит в нахождении матрицы гамильтониана в подходящем базисе  $\Phi_{\mathbf{p}}$  и последующем решении задачи на собственные значения стандартными средствами вычислительной линейной алгебры [143]. Результатом является разложение многочастичной волновой функции  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  по этому базису

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} \Phi_{\mathbf{p}}(x_1, \dots, x_N), \quad (2.3)$$

а также энергетический спектр системы. Базисные функции  $\Phi_{\mathbf{p}}(x_1, \dots, x_N)$  удобно выбрать в виде детерминантов Слэтера

$$\Phi_{\mathbf{p}}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(x_1) & \cdots & \psi_{\alpha_N}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\alpha_1}(x_N) & \cdots & \psi_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix}, \quad (2.4)$$

построенных на собственных функциях  $\psi_q(x)$  свободного одночастичного гамильтониана, а именно

$$\psi_q(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi q x}{L}. \quad (2.5)$$

Квантовое число  $q \in \mathbb{N}$ , нумерующее одночастичные состояния, аналогично импульсу в трансляционно-инвариантных системах, и будет иногда так называться для краткости. Вектор  $\mathbf{p} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$  обозначает многочастичное состояние с заполненными одночастичными состояниями  $\psi_{\alpha_i}$ , где  $i = 1 \dots N$ . В принятых здесь обозначениях  $\alpha_i < \alpha_l$  для  $i < l$ .

Для свободных частиц решением уравнения Шредингера является слэтеровский детерминант (2.4), построенный на  $N$  одночастичных состояниях с наименьшей энергией. В общем случае разложение (2.3) многочастичной волновой функции содержит бесконечно много членов. Их происхождение связано с тем, что взаимодействие разбрасывает электроны по возбужденным состояниям. Коэффициенты в разложении (2.3) стремятся к нулю для высокоэнергетических состояний. Поэтому в разложении достаточно оставить лишь члены с энергией  $E < \Lambda$ , где  $\Lambda$  есть масштаб обрезания по энергии. Вообще говоря,  $\Lambda$  порядка энергии электрон-электронного взаимодействия. Конкретное значение  $\Lambda$  ищется из условия, что рассматриваемые наблюдаемые достигают насыщения по мере его увеличения. Определив  $\Lambda$ , мы находим число базисных функций, участвующих в разложении, и размер матрицы гамильтониана. Используемый подход фильтрации базисных функций по энергии имеет очевидное преимущество перед распространенным подходом, в котором фиксируется наивысшее заполненное состояние  $M$ , а в качестве базиса используются все функции, порожденные сочетаниями  $\binom{M}{N}$ . Набор функций, сконструированный таким образом, раздут за счет высокоэнергетических состояний, вклад которых в разложение (2.3) априори мал.

После того, как набор функций, по которым проводится разложение, зафиксирован, проблема сводится к вычислению матрицы гамильтониана

$$H_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} = \int \Phi_{\mathbf{p}_1}^* H \Phi_{\mathbf{p}_2} dx_1 \dots dx_N. \quad (2.6)$$

Матричные элементы, которые даются правилами Слэтера [144–147], таковы [71; 148].

Матричные элементы кинетической энергии равны

$$T_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \sum_{i=1}^N k_i^2 \delta_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2}. \quad (2.7)$$

При вычислении матричных элементов парного е-е взаимодействия, возникают четыре ситуации, в зависимости от  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$ .

1. Если  $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ , то есть вычисляются диагональные элементы, то

$$V_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_1} = \sum_{i>j=1}^N V_{\alpha_i\alpha_j, \alpha_i\alpha_j}, \quad (2.8)$$

где

$$V_{\alpha_i\alpha_j, \alpha_k\alpha_l} = \int \phi_{\alpha_i\alpha_j}^*(x_1, x_2) V(x_1 - x_2) \phi_{\alpha_k\alpha_l}(x_1, x_2) dx_1 dx_2, \quad (2.9)$$

и

$$\phi_{\alpha_i\alpha_j}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_i}(x_1) & \psi_{\alpha_j}(x_1) \\ \psi_{\alpha_i}(x_2) & \psi_{\alpha_j}(x_2) \end{vmatrix}. \quad (2.10)$$

2. Если в состояниях  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  совпадают все числа заполнения, за исключением двух, с номерами  $k_1$  и  $k_2$ , соответственно, то есть если  $\mathbf{p}_1 = (\alpha_1, \dots, \alpha_{k_1}, \dots, \alpha_N)$ ,  $\mathbf{p}_2 = (\alpha_1, \dots, \beta_{k_2}, \dots, \alpha_N)$ , то

$$V_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} = (-1)^{k_1+k_2} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k_1}}^N V_{\alpha_{k_1}\alpha_i, \beta_{k_2}\alpha_i}, \quad (2.11)$$

3. Если в состояниях  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  совпадают все числа заполнения, за исключением четырех, с номерами  $k_i$ ,  $i = 1 \dots 4$ , то есть если  $\mathbf{p}_1 = (\alpha_1, \dots, \alpha_{k_1}, \dots, \alpha_{k_2}, \dots, \alpha_N)$ ,  $\mathbf{p}_2 = (\alpha_1, \dots, \beta_{k_3}, \dots, \beta_{k_4}, \dots, \alpha_N)$ , то

$$V_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} = (-1)^{\sum_{i=1}^4 k_i} V_{\alpha_{k_1}\alpha_{k_2}, \beta_{k_3}\beta_{k_4}}. \quad (2.12)$$

4. Если числа заполнения состояний  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  отличаются более, чем в четырех позициях  $\alpha_i$ , то

$$V_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} = 0. \quad (2.13)$$

Для матричных элементов потенциала взаимодействия электронов с положительным фоном есть три случая.

1. Если  $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ , то

$$U_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1} = \sum_{i=1}^N f_{\alpha_i \alpha_i}, \quad (2.14)$$

где

$$f_{\alpha_i \alpha_k} = \int \psi_{\alpha_i}^*(x) U(x) \psi_{\alpha_k}(x) dx. \quad (2.15)$$

2. Если в состояниях  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  совпадают все числа заполнения, за исключением двух, с номерами  $k_1$  and  $k_2$ , соответственно, то есть если  $\mathbf{p}_1 = (\alpha_1, \dots, \alpha_{k_1}, \dots, \alpha_N)$ ,  $\mathbf{p}_2 = (\alpha_1, \dots, \beta_{k_2}, \dots, \alpha_N)$ , то

$$U_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} = f_{\alpha_{k_1} \beta_{k_2}}. \quad (2.16)$$

3. В противном случае,  $U_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} = 0$ .

Матричные элементы электрон-электронного взаимодействия были вычислены для модельного потенциала вида

$$V(x_1 - x_2) = V \frac{e^2}{2\epsilon d} \exp(-|x_1 - x_2|/d), \quad (2.17)$$

где  $d$  есть радиус взаимодействия,  $\epsilon$  — проницаемость среды. Это позволяет нам найти матричные элементы аналитически, чтобы сократить время численного счета. Использование такой формы потенциала не является, по сути, ограничением, поскольку в расчетах мы можем изменять параметры  $V$  и  $d$  в широких пределах, моделируя как короткодействующее, так и дальнодействующее (на масштабе длины системы) взаимодействие.

Матричный элемент парного взаимодействия (2.9) равен

$$\begin{aligned} V_{l,j,k,m} = & \frac{Ve^2d}{2\epsilon L^2} [f(l,j,k,m) - f(l,j,k,-m) - \\ & f(l,j,-k,m) + f(l,j,-k,-m) - f(l,-j,k,m) + \\ & f(l,-j,k,-m) + f(l,-j,-k,m) - f(l,-j,-k,-m) - \\ & f(j,l,k,m) + f(j,l,k,-m) + f(j,l,-k,m) - \\ & f(j,l,-k,-m) + f(j,-l,k,m) - f(j,-l,k,-m) - \\ & f(j,-l,-k,m) + f(j,-l,-k,-m)], \end{aligned} \quad (2.18)$$

где  $f(l,n,k,m) = g(l+k, n+m)$ , причем функция  $g(p,q) = 0$  для нечетных  $p+q$ , а для четных  $p+q$  имеем

$$g(p,q) = (e^{-a}(-1)^p - 1) \frac{1 + \frac{\pi^2}{a^2} pq}{(1 + \frac{\pi^2}{a^2} p^2)(1 + \frac{\pi^2}{a^2} q^2)} + \frac{a}{1 + \frac{\pi^2}{a^2} p^2} \delta_{p,-q}, \quad (2.19)$$

где обозначено  $a = L/d$ . Матричный элемент (2.15) равен

$$f_{ln} = N \frac{Ve^2 d}{\epsilon L^2} (g(l+n,0) - g(l-n,0)). \quad (2.20)$$

Выразим теперь интересующие нас наблюдаемые через коэффициенты разложения (2.3). Функция распределения по одночастичным состояниям определена как

$$n(q) = \langle \Psi | c_q^\dagger c_q | \Psi \rangle, \quad (2.21)$$

где  $c_q$  есть оператор уничтожения электрона. Поскольку  $|\Phi_{\mathbf{p}}\rangle$  является собственным вектором оператора  $c_q^\dagger c_q$ , получаем

$$n(q) = \sum_{\mathbf{p}} |a_{\mathbf{p}}|^2 \theta_{\mathbf{p}}^q, \quad (2.22)$$

где  $\theta_{\mathbf{p}}^q$  есть число заполнения уровня  $q$  в многочастичном состоянии  $\mathbf{p}$ .

Среднее значение оператора плотности частиц

$$\rho = \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \quad (2.23)$$

равно

$$\rho(x) = \langle \Psi | \rho | \Psi \rangle = N \int \Psi^*(x, x_2, \dots, x_N) \Psi(x, x_2, \dots, x_N) dx_2 \dots dx_N. \quad (2.24)$$

Подставляя сюда разложение (2.3) и интегрируя, находим

$$\rho(x) = \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1}^* a_{\mathbf{p}_2} \gamma_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}(x), \quad (2.25)$$

где для  $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$

$$\gamma_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1}(x) = \sum_{i=1}^N |\psi_{\alpha_i}(x)|^2, \quad (2.26)$$

и

$$\gamma_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}(x) = (-1)^{k_1+k_2} \psi_{\alpha_{k_1}}^*(x) \psi_{\alpha_{k_2}}(x) \quad (2.27)$$

для случая, когда в состояниях  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  совпадают все числа заполнения, за исключением двух, с номерами  $k_1$  и  $k_2$ , соответственно; иначе  $\gamma = 0$ . Косинус-преобразование Фурье плотности есть

$$\rho(q) = \int_0^L \rho(x) \cos \frac{\pi qx}{L} dx, \quad q \in \mathbb{N}, \quad (2.28)$$

а синус-преобразование равно нулю, поскольку, согласно уравнениям (2.5), (2.26) и (2.27),  $\rho(x)$  содержит только косинусы.

### 2.2.2 Точная диагонализация

Ниже представлены расчеты, которые производились для системы, содержащей  $N = 12$  электронов [71]. Длина системы равна  $L = 333 a_B$ , радиус взаимодействия  $d = 33 a_B$ , где  $a_B$  есть боровский радиус в материале, амплитуда взаимодействия  $V = 3.6$ . Соответствующее значение параметра неидеальности электронной жидкости  $r_s = (2na_B)^{-1}$  равно 13.9, а оценка параметра взаимодействия латтинджерской жидкости  $g = (1 + V_{q=0}/\pi\hbar v_F)^{-0.5}$  дает 0.3. Таким образом, рассматривается система с сильным взаимодействием. Его учет представляет значительные сложности в рамках пертурбативных подходов, но в то же время это вполне достижимо с помощью точной диагонализации.

Функция распределения  $n(q)$  по одночастичным состояниям  $\psi_q$  показана на рисунке 2.1. Вдали от ферми-поверхности форма кривой  $n(q)$  сглаживается взаимодействием, в согласии с теорией латтинджерской жидкости, однако на уровне Ферми возникает неожиданная  $\delta$ -образная сингулярность, причем значение функции распределения  $n(k_F)$  близко к 1.

Мы исследовали сингулярность в функции распределения  $n(q)$ , выполнив аналогичные расчеты для систем с числом электронов от 3 до 20, варьируя параметры длины и амплитуду взаимодействия на два порядка величины. Мы нашли, что результат устойчив по отношению к изменению параметров системы  $(L, d, V, N)$ .

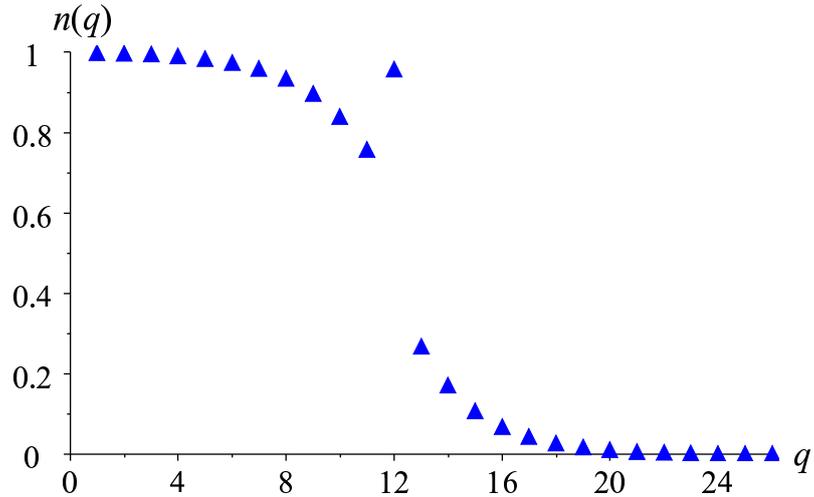


Рисунок 2.1 — Функция распределения по одночастичным состояниям  $n(q)$ , рассчитанная для системы с  $N = 12$  электронами. Значение  $q = 12$  соответствует фермиевскому импульсу  $k_F$ .

Следовательно,  $\delta$ -сингулярность в функции распределения  $n(q)$  при  $q = k_F$  есть универсальное свойство конечных 1D систем. Ее происхождение будет объяснено ниже.

Мы также вычислили пространственное распределение плотности электронов  $\rho(x)$  в основном состоянии, и нашли, что  $\rho(x)$  представляет собой осциллирующую функцию, амплитуда которой убывает от границ вглубь системы. Для анализа упорядочения в электронном состоянии наиболее информативной величиной является Фурье-преобразование электронной плотности  $\rho(q)$ , которое показано на рисунке 2.2 как функция квантового числа  $q$ . Для сравнения на рисунке также приведены результаты для свободных электронов.

В отсутствие взаимодействия,  $\rho(q)$  имеет вид ступеньки, причем  $\rho(q) = -0.5$  для  $0 < q \leq 2k_F$ , и  $\rho(q) = 0$  для  $q > 2k_F$ . Неожиданным результатом является то, что значения  $\rho(q)$  остаются очень близкими к нулю при  $q > 2k_F$  также и во взаимодействующей системе, даже при сильном взаимодействии. Однако, в области  $0 < q \leq 2k_F$   $e$ - $e$  взаимодействие кардинально изменяет картину. Гармоника плотности с  $q = 2k_F$  сильно возрастает, достигая значений, сравнимых с фоновой плотностью  $\rho(0) = N$ . При этом гармоники  $\rho(q)$  с  $0 < q < 2k_F$  подавляются взаимодействием, и тем

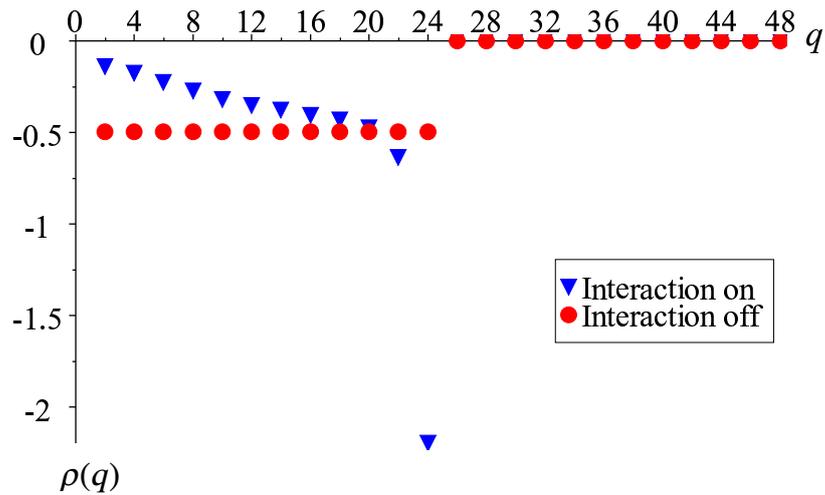


Рисунок 2.2 — Фурье-преобразование пространственного распределения плотности электронов. Значение  $q = 24$  соответствует  $2k_F$ . Красными кружками показаны результаты для невзаимодействующей системы, синими треугольниками — для системы со взаимодействием.

сильнее, чем сильнее взаимодействие. Следовательно, взаимодействие приводит к сильным корреляциям электронной плотности на масштабе среднего расстояния между частицами, то есть, иными словами, к вигнеровскому упорядочению.

Следует подчеркнуть, что полученные результаты являются точными, поскольку они основаны на правильной многоэлектронной волновой функции. Интересно сравнить их с результатами существующих аналитических теорий. Наиболее продвинутой теорией сильно коррелированного электронного состояния в одномерных квантовых точках является теория ограниченной латтинджерской жидкости, основанная на методе бозонизации с нулевыми граничными условиями [45; 112; 113]. Эта теория коротко изложена в Приложении A. В следующей секции мы с ее помощью рассчитаем интересующие нас наблюдаемые.

### 2.2.3 Теория ограниченной латтинджеровой жидкости

Пространственное распределение электронной плотности и функция распределения электронов по одночастичным состояниям выражаются через функцию Грина хиральных фермионов  $G_+(x,y) = \langle \psi_+^\dagger(y)\psi_+(x) \rangle$ , а именно:

$$n(q) = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx dy G_+(x,y) e^{iq(y-x)}, \quad (2.29)$$

и  $\rho(x) = -e^{-2ik_F x} G_+(-x,x) + \text{с.с.}$  Пользуясь бозонным представлением полевого оператора, функцию Грина легко вычислить [45; 71]:

$$G_+(x,y) = \frac{1}{\beta L} \frac{(e^\beta - 1)^{\frac{g^2+1}{2g}}}{2^{\frac{(g+1)^2}{4g} + 1}} \left( e^\beta - e^{i\frac{\pi}{L}(x-y)} \right) \times \frac{\left[ \left( \cosh \beta - \cos \frac{2\pi x}{L} \right) \left( \cosh \beta - \cos \frac{2\pi y}{L} \right) \right]^{\frac{g^{-1}-g}{8}}}{\left[ \cosh \beta - \cos \frac{2\pi(x-y)}{L} \right]^{\frac{(g+1)^2}{4g}} \left[ \cosh \beta - \cos \frac{2\pi(x+y)}{L} \right]^{\frac{1-g^2}{4g}}}, \quad (2.30)$$

где безразмерный параметр обрезания есть  $\beta \approx N^{-1}$ .

Функция распределения по одночастичным состояниям представлена на рисунке 2.3. Сравнение с точной диагонализацией показывает, что латтинджерова модель приводит к качественно неправильному результату. Функция распределения, вычисленная в рамках теории ограниченной латтинджеровой жидкости, также имеет особенность при  $q = k_F$ , однако вместо  $\delta$ -пика при  $q = k_F$ ,  $n(q)$  отклоняется от сглаженной взаимодействием фермиевской ступеньки в целой зоне квантовых чисел вокруг  $k_F$ , причем форма кривой близка к производной  $\delta$ -пика.

Здесь уместно подчеркнуть, что поскольку бозонизация применима лишь для описания низкоэнергетических возбуждений над основным состоянием, результаты для  $n(q)$  справедливы лишь вблизи ферми-поверхности при  $|k_F - q| \ll k_F$ . Экспоненциальное подавление  $n(q)$  при  $k_F - q \approx k_F$  есть следствие ультрафиолетового обрезания, произведенного в теории для исключения высокоэнергетического отклика позитронного моря. Ультрафиолетовое обрезание не затрагивает низкоэнергетическую область вблизи уровня Ферми.

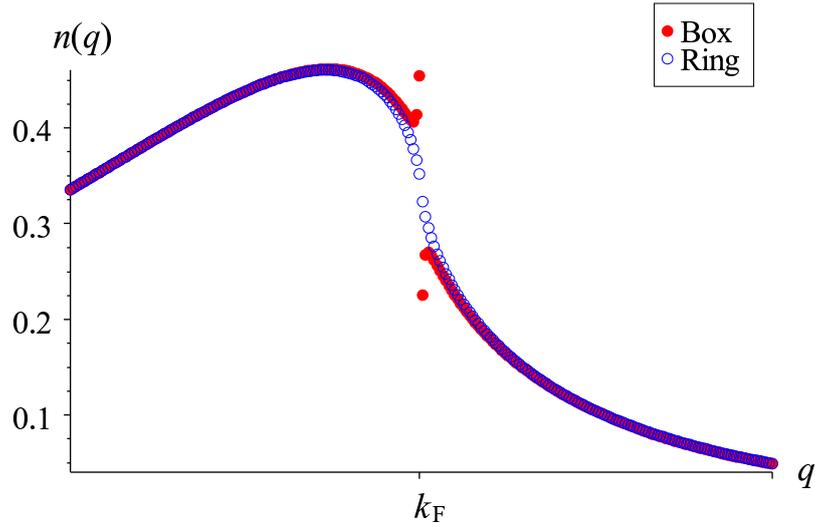


Рисунок 2.3 — Функция распределения по одночастичным состояниям в теории латтинджерской жидкости с нулевыми (кружочки) и периодическими (пунктир) граничными условиями, параметр взаимодействия  $g = 0.3$ .

Электронная плотность, вычисленная с помощью уравнения (2.30), равна

$$\rho(x) = \frac{N}{L} \left[ 1 - 2^{\frac{g}{2}} \sinh^g(\beta/2) \frac{\cos(2k_F x - 2f(x))}{[\cosh \beta - \cos(2\pi x/L)]^{g/2}} \right], \quad (2.31)$$

где функция  $f(x)$ , которая отражает вклад в фазу наличия границ у системы, равна

$$f(x) = \frac{1}{2} \arctan \frac{\sin(2\pi x/L)}{e^\beta - \cos(2\pi x/L)}. \quad (2.32)$$

Фурье-преобразование плотности представлено на рисунке 2.4. Как видно из сравнения с точной диагонализацией, и этот результат содержит качественную ошибку. Она состоит в том, что плотность  $\rho(q)$  не обращается в ноль при  $q > 2k_F$ , а напротив, расходится при  $q \rightarrow 2k_F + 0$ . Иными словами, в области  $q > 2k_F$  возникает целая ветвь значений  $\rho(q)$ , отсутствующая в точном решении.

Итак, теория ограниченной латтинджерской жидкости некорректно описывает корреляционные функции на масштабе фермиевского импульса и кратном ему. Это масштаб соответствует среднему расстоянию между частицами. Следовательно, в теории возникает проблема при описании короткомасштабных корреляций, которые отвечают за возникновение вигнеровского упорядочения в одномерных квантовых точках. Ниже мы продемонстрируем, что теория ограниченной латтинджерской

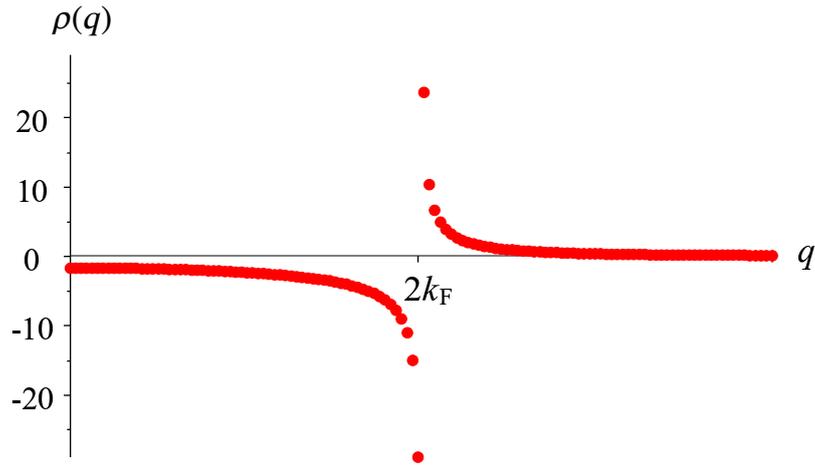


Рисунок 2.4 — Фурье-преобразование электронной плотности в модели Латтинджера с нулевыми граничными условиями, параметр взаимодействия  $g = 0.3$ .

жидкости описывает вигнеровский кристалл, деформированный по сравнению с точным решением, а в основе такого расхождения лежит глубокая проблема этой теории: несохранение полного числа частиц в системе.

## 2.2.4 Модель вигнеровской молекулы

Рассмотрим простую модель [71], которая с самого начала принимает во внимание вигнеровское упорядочение. В этой модели многоэлектронная волновая функция  $\Phi(y_1, \dots, y_N)$  представляет собой слэтеров детерминант

$$\Phi(y_1, \dots, y_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi(y_1 - x_1) & \cdots & \phi(y_1 - x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi(y_N - x_1) & \cdots & \phi(y_N - x_N) \end{vmatrix}, \quad (2.33)$$

построенный на одночастичных волновых функциях  $\phi(x) = \pi^{-1/4} a^{-1/2} \exp(-x^2/2a^2)$ , локализованных в пространстве в точках  $x_k$ ,  $k = 1 \dots N$ . Ширина волновой функции  $a$  предполагается меньшей, чем расстояние между частицами  $L/N$ , поэтому

одночастичные волновые функции практически не перекрываются и образуют ортонормированный набор.

Фурье-преобразование плотности  $\rho(q)$  есть

$$\rho(q) = e^{-\frac{\pi^2 q^2 a^2}{4L^2}} \sum_{k=1}^N \cos \frac{\pi q x_k}{L}. \quad (2.34)$$

Функция распределения  $n(q)$  по одночастичным состояниям  $\psi_q(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi q y}{L}$  связана с одночастичной функцией Грина  $G(x,y) = \langle \psi^+(y)\psi(x) \rangle$  соотношением, аналогичным уравнению (2.29):

$$n(q) = \int_0^L dx dy G(x,y) \psi_q^*(x) \psi_q(y). \quad (2.35)$$

Между функцией Грина и одночастичной матрицей плотности

$$\rho(x,y) = \int \Phi^*(y, z_2, \dots, z_N) \Phi(x, z_2, \dots, z_N) dz_2 \dots dz_N \quad (2.36)$$

существует простое соотношение:  $G(x,y) = N\rho(x,y)$  [64]. Подставив его в уравнение (2.35), получим

$$n(q) = N \int dz \left| \int dy \Phi^*(y, \mathbf{z}) \psi_q(y) \right|^2, \quad (2.37)$$

где  $\mathbf{z} = (z_2, \dots, z_N)$ . Используя уравнение (2.33), мы приходим к

$$\begin{aligned} n(q) &= \sum_k \left| \int dy \phi^*(y - x_k) \psi_q(y) \right|^2 \\ &= 4\sqrt{\pi} \frac{a}{L} e^{-\frac{\pi^2 q^2 a^2}{L^2}} \sum_{k=1}^N \sin^2 \frac{\pi q x_k}{L}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Сначала рассмотрим случай вигнеровского кристалла, для которого  $x_k = (k - \frac{1}{2})\frac{L}{N}$ . Фурье-преобразование плотности  $\rho(q)$  отлично от нуля лишь для значений  $q$ , кратных  $2k_F$ ,

$$\rho(n \cdot 2k_F) = (-1)^n N e^{-a^2 k_F^2 n^2}. \quad (2.39)$$

Функция распределения по одночастичным состояниям  $n(q)$  равна [71]

$$n(q) = \frac{2\sqrt{\pi} a N}{L} \left[ 1 - \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \delta_{q, mN} \right] \exp\left(-\frac{a^2 \pi^2}{L^2} q^2\right). \quad (2.40)$$

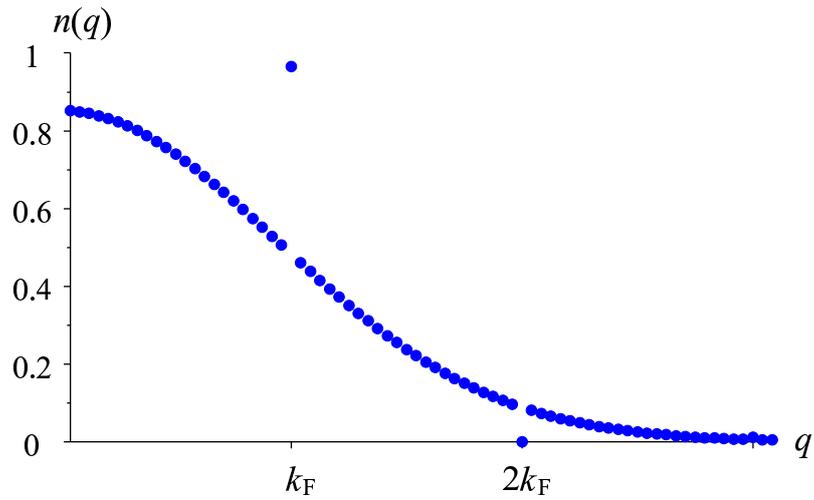


Рисунок 2.5 — Функция распределения по одночастичным состояниям в модели локализованных электронов.

Рисунок 2.5 показывает, что  $n(q)$  полностью согласуется с результатами точной диагонализации, включая  $\delta$ -пик на уровне Ферми. Более того, дополнительные  $\delta$ -особенности при значениях  $q$ , кратных  $k_F$ , которые предсказывает уравнение (2.40), действительно возникают в точном решении при достаточно сильном взаимодействии, как видно из рисунка 2.6.

Эта модель доказывает, что происхождение сингулярностей в  $n(q)$  связано с упорядочением электронов в ограниченной одномерной системе. В бесконечных одномерных системах вигнеровское упорядочение разрушается флуктуациями, и короткомасштабные корреляции проявляются только в динамических откликах системы на внешнее возмущение [70]. Такие отклики детально изучались в предыдущей главе. Если же система конечна, ее границы пиннируют волну зарядовой плотности, приводя к фриделевским осцилляциям, амплитуда которых увеличивается благодаря электрон-электронному взаимодействию. Это приводит к возрастанию веса, с которым в волновую функцию входит гармоника с  $q = k_F$ , что отражается непосредственно в функции распределения по одночастичным состояниям, а также в большой величине  $2k_F$ -гармоники плотности. Вывод о важной роли короткомасштабных электронных корреляций в ограниченных одномерных системах подтверждается

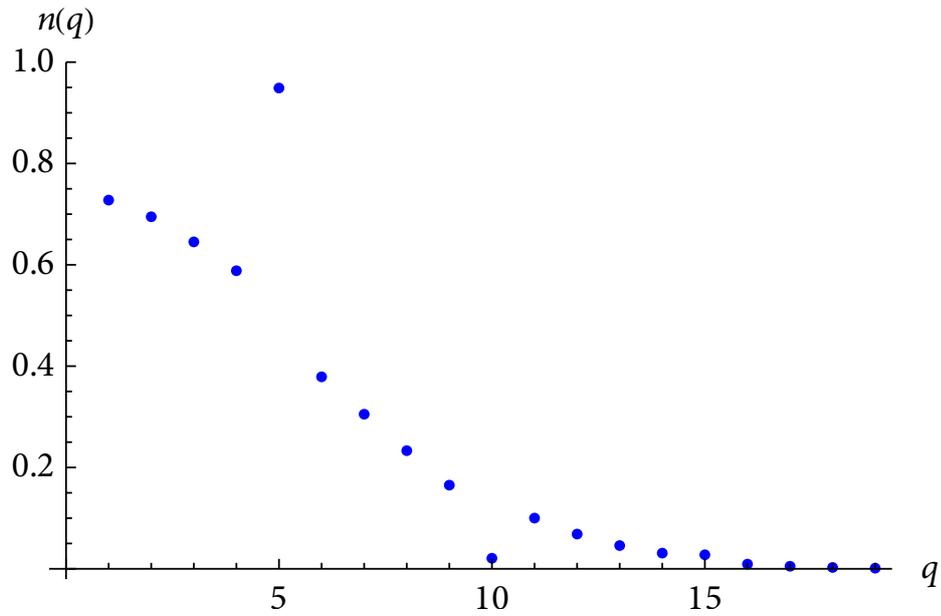


Рисунок 2.6 — Функция распределения по одночастичным состояниям, рассчитанная с помощью точной диагонализации для системы из  $N = 5$  электронов с параметром взаимодействия  $g \approx 0.1$ . Значение  $q = 5$  соответствует  $k_F$ .

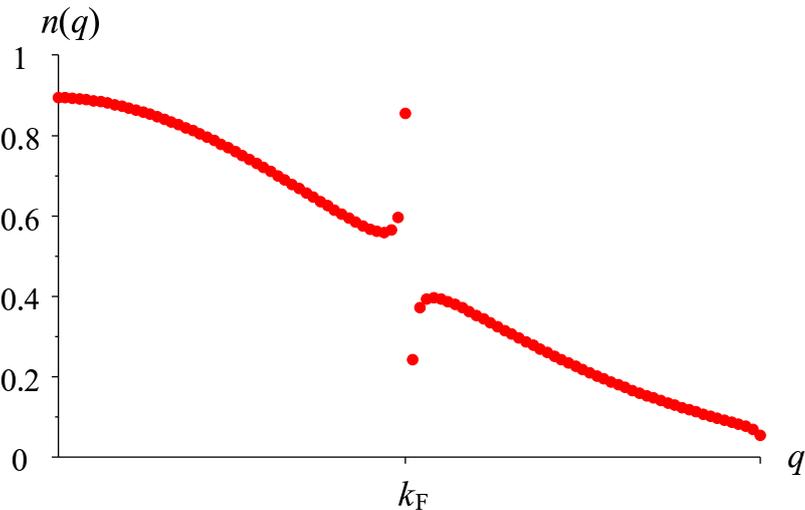


Рисунок 2.7 — Функция распределения по одночастичным состояниям деформированного вигнеровского кристалла.

анализом функции распределения по одночастичным состояниям для электронов на кольце, то есть в конечной системе без границ. В этом случае сингулярность в функции распределения исчезает, как видно из рисунка 2.3.

Деформируем вигнеровскую молекулу, то есть введем поле смещения электронной плотности  $\delta x_k \propto -(k - \frac{N}{2})\frac{L}{N}$ . Функция распределения по одночастичным

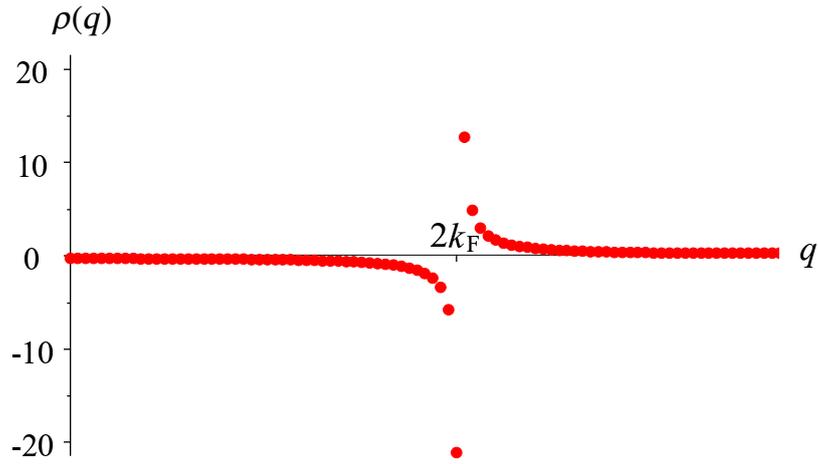


Рисунок 2.8 — Фурье-преобразование электронной плотности деформированного вигнеровского кристалла.

состояниям и фурье-преобразование электронной плотности, вычисленные с помощью уравнений (2.34) и (2.38) в этом случае, представлены на рисунках 2.7 и 2.8. Результаты аналогичны результатам предыдущей секции. Это означает, что теория ограниченной латтинджеровой жидкости описывает электронное состояние, деформированное по сравнению с точным решением. Происхождение этой деформации и решение проблемы обсуждаются в следующей секции.

### 2.2.5 Бозонизация, соблюдающая сохранение числа частиц

Корень проблемы кроется в операторе плотности (A.36), который обычно используется в методе бозонизации. Как подробно обсуждалось в предыдущей главе, этот оператор плотности нарушает сохранение числа частиц в системе, то есть ее полную электронейтральность. В этом легко убедиться, заметив, что интеграл от флуктуации плотности (второй член в уравнении (2.31)) по длине системы отличен от нуля. Это хорошо известная проблема, возникающая и в стандартной

бозонизации на прямой [70]. Физическая причина нарушения сохранения числа частиц заключается в том, что  $2k_F$ -компонента оператора плотности (A.36) содержит отклик бесконечного позитронного моря, который не полностью исключается при использовании приближенного соотношения между полевыми операторами реальных электронов и вспомогательных  $r$ -фермионов.

В случае нулевых граничных условий, ситуация становится даже богаче, поскольку здесь проблема возникает уже с длинноволновой компонентой плотности. В самом деле, уравнение (2.31) латтинджерской теории не дает правильного предельного перехода к случаю взаимодействующих электронов в боксе. Плотность свободных электронов

$$\rho_{\text{free}}(x) = \frac{N}{L} + \frac{1}{2L} - \frac{\sin(2k_F + \frac{\pi}{L})x}{2 \sin \frac{\pi x}{L}} \quad (2.41)$$

содержит дополнительный член  $1/2L$ , отсутствующий в уравнении (2.31). Интеграл от этого члена по длине системы дает дополнительный заряд  $e/2$ .

Для построения корректной аналитической теории, мы воспользуемся оператором плотности, сохраняющим полное число частиц в системе [70; 71]. Этот оператор был выведен в предыдущей главе и дается уравнением (1.13). Он представляет собой полный дифференциал, что гарантирует обращение в ноль интеграла от флуктуации электронной плотности по длине системы, то есть сохранение числа частиц. Длинноволновая компонента этого оператора содержит дополнительный член  $-\partial_x f/\pi$ , который дает вклад  $1/2L$ , недостающий в (2.31), поскольку вдали от границ системы  $f(x) \approx \frac{\pi}{4} - \frac{\pi x}{2L}$ .

Оператор электрон-электронного взаимодействия (A.39), вычисленный с оператором плотности (1.13), получает дополнительный вклад

$$H_1 = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^L dx \partial_x \varphi \partial_x f = iV \sum_{q>0} \sqrt{\frac{gq}{8\pi L}} (\tilde{b}_{2q}^+ - \tilde{b}_{2q}). \quad (2.42)$$

Переходя к новым бозонным операторам

$$d_{2q} = \tilde{b}_{2q} + i \frac{V}{4v_F} \sqrt{\frac{g^3}{2\pi qL}}, \quad (2.43)$$

мы получаем полный диагонализированный гамильтониан  $H + H_1$ ,

$$H + H_1 = \sum_{q>0} qv(q)d_q^+ d_q. \quad (2.44)$$

Бозонная фаза (A.31) преобразуется как  $\phi(x) = \phi_0(x) + \phi_1(x)$ , причем фаза  $\phi_0(x)$  линейна по новым бозе-операторам,

$$\phi_0(x) = \sum_{q>0} \sqrt{\frac{\pi}{qL}} [(ce^{iqx} - se^{-iqx})d_q + (ce^{-iqx} - se^{iqx})d_q^+], \quad (2.45)$$

где  $c$  и  $s$  равны, соответственно,  $\cosh \xi$  и  $\sinh \xi$ . Функция  $\phi_1(x) = Af(x)$  есть новая фаза, специфичная для случая нулевых граничных условий. Важно, что ее амплитуда  $A$  связана с величиной электрон-электронного взаимодействия:  $A = Vg^2/2\pi v_F$ .

В результате полевой оператор (A.30) приобретает множитель  $\exp(iAf(x))$ , а функция Грина (2.30) преобразуется как

$$G_{\text{new}}(x,y) = G_+(x,y)e^{iA(f(x)-f(y))}. \quad (2.46)$$

Среднее значение электронной плотности равно [71]

$$\langle \rho(x) \rangle = \frac{k_F}{\pi} - (1-A)\frac{\partial_x f}{\pi} - \frac{\sinh^g(\beta/2)}{2^{1-g/2}\pi} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\sin(2k_F x - 2(1-A)f(x))}{[\cosh \beta - \cos \frac{2\pi x}{L}]^{g/2}}. \quad (2.47)$$

Дополнительная фаза  $(1-A)f(x)$  в уравнении (2.47) изменяет период осциллирующей электронной плотности. Поскольку  $\partial_x f < 0$  во всей системе кроме узких областей вблизи границ, вигнеровский кристалл оказывается деформирован границами. В стандартной теории ограниченной латтинджерской жидкости  $A = 0$ . Наш подход с исправленным оператором плотности (1.13) приводит к условию  $A > 0$ . Следовательно, восстановление в системе полной электронной нейтральности приводит к уменьшению деформации вигнеровского кристалла.

Функция распределения по одночастичным состояниям  $n(q)$  и фурье-спектр плотности хорошо согласуются с точным результатом метода конфигурационного взаимодействия при использовании приведенного выше выражения для амплитуды  $A$ . Применение этой формулы оправдано при достаточно слабом взаимодействии ( $1 -$

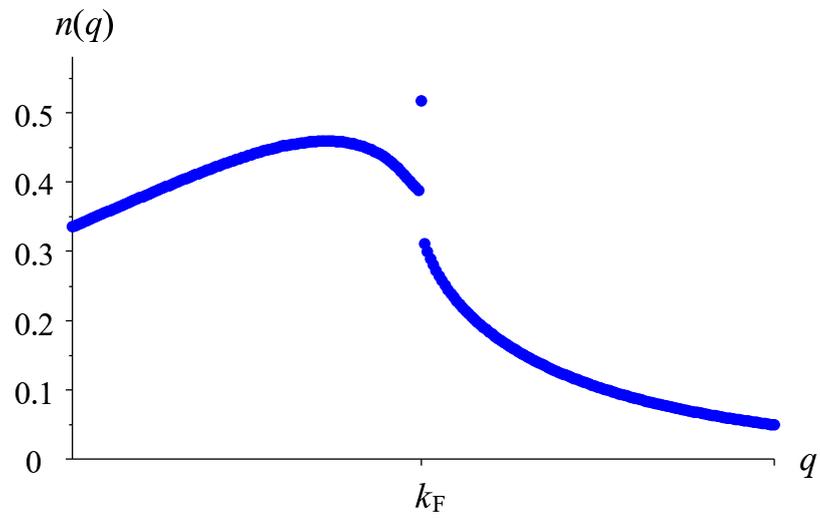


Рисунок 2.9 — Функция распределения по одночастичным состояниям, сохранение числа частиц соблюдается.

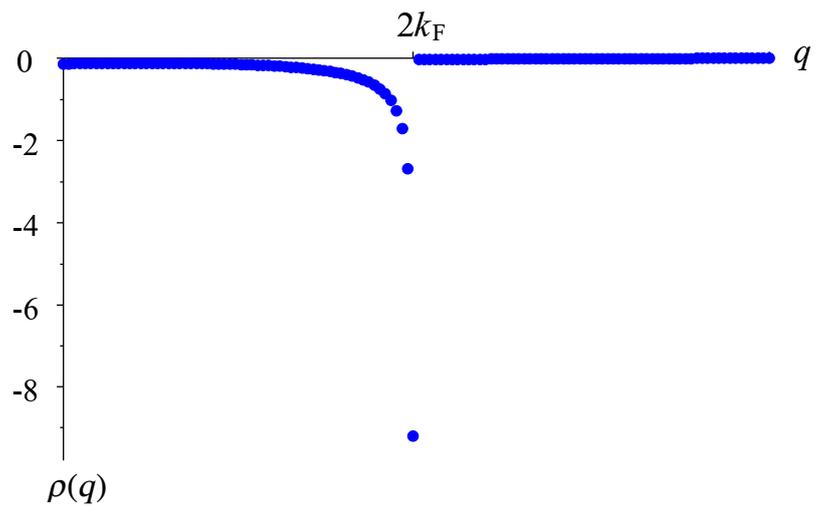


Рисунок 2.10 — Фурье-преобразование электронной плотности, сохранение числа частиц соблюдается.

$g \ll 1$ ). Нахождение связи между феноменологическим параметром взаимодействия латтинджеровой жидкости и потенциалом взаимодействия электронов в общем случае представляет собой известную проблему [52; 115], для решения которой необходимо располагать результатами микроскопической модели и, кроме того, всегда требуется контролировать выполнение предельных переходов к известным случаям. Связь между  $g$  и  $A$  мы установили, исходя из трех принципов:

1. При  $g = 1$ , должно быть  $A = 0$ , чтобы обеспечить правильный предельный переход к невзаимодействующим электронам.
2. Для слабого взаимодействия  $1 - g \ll 1$ ,  $A$  должно быть пропорционально  $V/2\pi v_F$ , в соответствии с нашей моделью.
3. Для сильного взаимодействия  $g \rightarrow 0$ , должно выполняться  $A \rightarrow 1$ , чтобы обеспечить переход к вигнеровскому кристаллу с периодической плотностью в пространстве.

Соотношение  $A = 1 - g$  отвечает всем трем принципам и отлично согласуется с результатами точной диагонализации, как видно из рисунков 2.9 и 2.10, где показаны функция распределения по одночастичным состояниям и фурье-преобразование электронной плотности, вычисленные в соответствии с уравнениями (2.46) и (2.47) [71].

На рисунке 2.11 показаны три результата для пространственного распределения электронной плотности, которые были вычислены в соответствии с уравнениями (2.31), (2.41), и (2.47). Видно, что максимумы в распределении электронной плотности, вычисленной с помощью теории ограниченной латтинджеровой жидкости, практически совпадают с максимумами в плотности свободных электронов, даже при сильном взаимодействии. Напротив, при учете сохранения числа частиц в системе положения электронов сдвинуты по направлению к периодическим позициям, как это и должно быть при вигнеровском упорядочении в случае сильного взаимодействия. Следовательно, не сохраняющая число частиц теория ограниченной латтинджеровой жидкости приводит к картине вигнеровской молекулы, сжатой к центру системы [71].

Найденные результаты относятся к конечным и ограниченным одномерным системам. Обнаруженные особенности в функции распределения по одночастичным

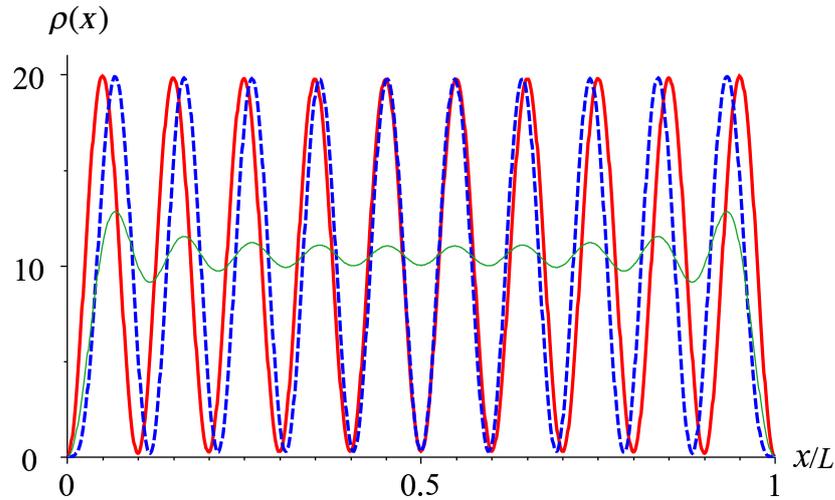


Рисунок 2.11 — Пространственное распределение электронной плотности, вычисленное в соответствии с теорией ограниченной латтинджеровой жидкости (штриховая линия), для свободных электронов (тонкая сплошная линия), и с соблюдением сохранения числа частиц в системе (сплошная линия).

состояниям и в фурье-спектре электронной плотности сохраняются при увеличении длины системы. До тех пор, пока спектр остается дискретным, дельта-особенность функции распределения относится к единственной точке  $q = k_F$ . Формально говоря, эта особенность выживает и при  $L \rightarrow \infty$ . Однако, это предельный переход сам по себе не эквивалентен термодинамическому пределу, в котором также требуется принять во внимание процессы потери когерентности и сбоя фазы. В корректно выполненном термодинамическом пределе обе найденные особенности должны исчезнуть вместе со всеми остальными эффектами, обусловленными наличием границ.

## 2.3 Эффекты электрон-электронного взаимодействия в синглет-триплетных переходах в одномерных квантовых точках

В этом разделе изучаются энергетический спектр и спиновые состояния одномерной квантовой точки, содержащей два взаимодействующих электрона, при наличии магнитного поля и спин-орбитального взаимодействия. Парное взаимодействие электронов учитывается точно в аналитической модели с короткодействующим  $\delta$ -образным потенциалом, а также численно точно в случае дальнодействующего взаимодействия. Ключевое соображение в этой задаче состоит в том, что электрон-электронное взаимодействие вносит различный вклад в энергию синглетных и триплетных состояний благодаря различной пространственной симметрии орбитальных волновых функций [14]. Поэтому достаточно сильное взаимодействие приводит к пересечению синглетных и триплетных термов даже при слабых магнитных полях. Разумеется, пересечение термов само по себе не гарантирует осуществление синглет-триплетного перехода, поскольку для перемешивания состояний с различным спином требуется дополнительное спин-зависимое взаимодействие. В качестве такого взаимодействия мы рассматриваем спин-орбитальное взаимодействие, линейное по импульсу электронов (спин-орбитальное взаимодействие Рашбы или Дрессельхауза [33]).

Совместный эффект магнитного поля, спин-орбитального взаимодействия и электрон-электронного взаимодействия был привлечен в недавних работах [149–151] для анализа экспериментально определенных энергетических спектров квантовых точек. В этой секции подробно изучен эффект электрон-электронного взаимодействия переменной величины. Мы показали, что синглет-триплетные переходы возникают лишь благодаря совместному действию магнитного поля и спин-орбитального взаимодействия. Величина щели в энергетическом спектре в окрестности точки синглет-триплетного перехода зависит от относительного направления внешнего магнитного поля и эффективного поля спин-орбитального

взаимодействия. Критическое магнитное поле  $B_c$  существенно уменьшается с увеличением электрон-электронного взаимодействия, как и величина щели.

### 2.3.1 Аналитическая модель с короткодействием

Гамильтониан квантовой точки, содержащей два электрона, равен

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{1}{2} g \mu_B (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i) + eU(\mathbf{r}_i) \right] + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + H_{\text{SOI}}. \quad (2.48)$$

Здесь  $\mathbf{p}_i$  есть импульс  $i$ -го электрона,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал,  $\mathbf{B}$  — магнитное поле,  $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  — вектор Паули,  $g$  есть эффективный  $g$ -фактор,  $U(\mathbf{r})$  есть потенциал квантового конфайнмента,  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  есть потенциал электрон-электронного взаимодействия, а  $H_{\text{SOI}}$  — гамильтониан спин-орбитального взаимодействия. Поскольку нас преимущественно интересуют эффекты электрон-электронного взаимодействия в синглет-триплетных переходах, мы упростим наш гамильтониан, рассматривая квантовую точку как бокс с высокими стенками, вытянутый в направлении оси  $x$ , с пренебрежимо малыми размерами в двух других направлениях. В таком случае волновая функция  $\Psi$  зависит, по существу, лишь от координат  $x_1, x_2$  и подчиняется нулевым граничным условиям на концах отрезка  $[0, L]$ :  $\Psi(x_1, x_2) = 0$ , если хотя бы один из аргументов равен 0 или  $L$ . Магнитное поле направим вдоль оси  $x$ , так что векторный потенциал в гамильтониане может быть опущен. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия запишем в общей форме, линейной по импульсу:

$$H_{\text{SOI}} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{i=1}^2 p_{x_i} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i), \quad (2.49)$$

где  $\boldsymbol{\alpha} \equiv (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$  есть параметр спин-орбитального взаимодействия, причем направление вектора  $\boldsymbol{\alpha}$  показывает направление эффективного магнитного поля, созданного спин-орбитальным взаимодействием.

Для начала, рассмотрим простейший случай, когда эффективный одномерный потенциал электрон-электронного взаимодействия является короткодействующим,

$$V(x_1 - x_2) = e^2 V \delta(x_1 - x_2), \quad (2.50)$$

а спин-орбитальное взаимодействие мало. В этом случае задача допускает аналитическое решение.

В нулевом приближении по величине спин-орбитального взаимодействия, волновые функции  $\Psi^{(S,T)}$  описывают синглетные и триплетные состояния, в зависимости от полного спина  $S$  и проекции  $S_x$ , и представляют собой произведение орбитальной и спиновой части.

Триплетное состояние обладает антисимметричной орбитальной волновой функцией  $\Psi^{(T)}(x_1, x_2)$ , которая обращается в нуль при  $x_1 = x_2$ , то есть в точности там, где отличен от нуля  $\delta$ -потенциал электрон-электронного взаимодействия. Следовательно,  $\Psi^{(T)}(x_1, x_2)$  не зависит от взаимодействия и совпадает с волновой функцией свободных частиц,

$$\Psi_{l,n}^{(T)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{L} \left[ \sin\left(\frac{l\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x_2}{L}\right) - \sin\left(\frac{l\pi x_2}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x_1}{L}\right) \right], \quad (2.51)$$

где  $l, n \in \mathbb{N}$ . Триплетные термы расщепляются в магнитном поле как

$$E_{l,n}^{(T)} = E^* \frac{(l^2 + n^2)}{2} + g \frac{\hbar \omega_B}{2} S_x, \quad (2.52)$$

где масштаб энергии есть  $E^* = \hbar^2 \pi^2 / mL^2$ ,  $\omega_B = eB/mc$  есть циклотронная частота, а  $S_x$  принимает значения 0 и  $\pm 1$ , соответственно, для состояний со спиновыми функциями  $|T^0\rangle = |S = 1, S_x = 0\rangle$  и  $|T^\pm\rangle = |1, \pm 1\rangle$ .

Орбитальная часть синглетной волновой функции  $\Psi_{k_1, k_2}^{(S)}(x_1, x_2)$  зависит от потенциала взаимодействия. Прямолинейное вычисление дает, с точностью до нормировки, [152]

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1, k_2}^{(S)}(x_1, x_2) = & \left( \frac{U}{2k_1} \sin k_1 |\xi| + \cos k_1 \xi \right) \left( \frac{U}{2k_2} \sin k_2 \zeta + \cos k_2 \zeta \right) \\ & - \left( \frac{U}{2k_2} \sin k_2 |\xi| + \cos k_2 \xi \right) \left( \frac{U}{2k_1} \sin k_1 \zeta + \cos k_1 \zeta \right), \end{aligned} \quad (2.53)$$

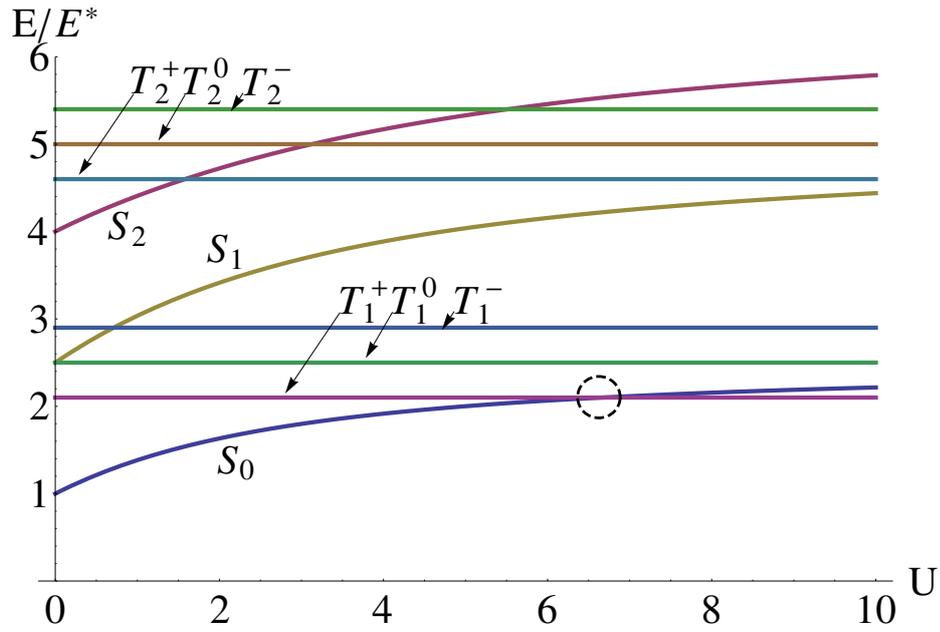


Рисунок 2.12 — Энергетический спектр двух электронов в квантовой точке в зависимости от величины электрон-электронного взаимодействия, для  $\hbar\omega_B/E^* = 0.08$ ,  $g = -10$ . Кружок показывает пересечение основного состояния  $S_0$  с триплетным состоянием  $T_1^+$  ( $T_1$  обозначает триплетное состояние с  $l = 1$ ,  $n = 2$ ;  $T_2$  — с  $l = 1$ ,  $n = 3$ ).

где  $\xi = \pi(x_1 - x_2)/L$ ,  $\zeta = \pi(x_1 + x_2)/L$ ,  $U = VL/\pi a_B$ , а  $a_B$  есть боровский радиус. Квантовые числа  $k_1$  и  $k_2$  зависят от  $U$  и определяются из соотношений

$$(k_1, k_2) \in \{(k_1, k_2) \mid k_i \operatorname{tg} k_i \pi = U/2, 1 \leq i \leq 2\} \cup \{(k_1, k_2) \mid k_i \operatorname{ctg} k_i \pi = -U/2, 1 \leq i \leq 2\}. \quad (2.54)$$

Энергия синглетного состояния равна  $E_{k_1, k_2}^{(S)} = E^*(k_1^2 + k_2^2)$ .

Интересно отметить, что само существование синглетных состояний в одномерной квантовой точке с двумя электронами, взаимодействующими с помощью  $\delta$ -образного потенциала, оспаривалось в работе [153]. В этой статье синглетные состояния были пропущены авторами из-за ошибки. Их результат противоречит работам [152; 154].

Анализ показывает, что  $E_{k_1, k_2}^{(S)}$  монотонно растет с увеличением  $U$ , пересекая триплетные уровни, как показано на рисунке 2.12. Пересечение синглетного термина основного состояния с возбужденным триплетным возможно лишь при наличии магнитного поля. Если магнитного поля нет, основное состояние остается синглетным при любом, сколь угодно сильном, электрон-электронном взаимодействии, не

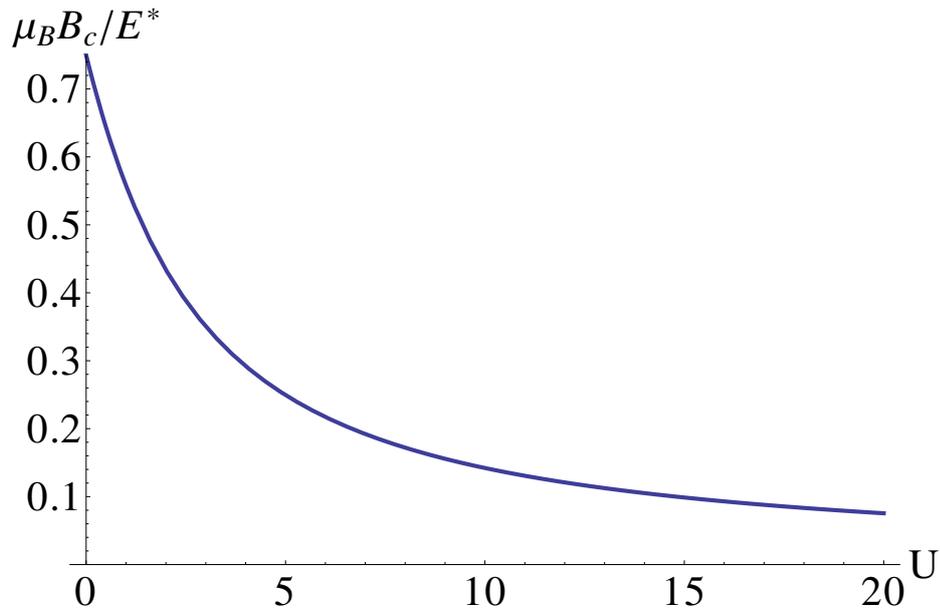


Рисунок 2.13 — Критическое магнитное поле как функция  $U$ .

пересекая первый возбужденный терм, в соответствии с теоремой Вигнера [48]. При этом уровни энергии возбужденных состояний могут пересекаться даже при  $B = 0$ , когда энергия электрон-электронного взаимодействия превышает расстояние между уровнями. Например, возбужденный синглетный терм  $S_2$  пересекает триплетный терм  $T_2$ , как видно из рисунка 2.12.

Критическое значение магнитного поля  $B_c$ , при котором синглетный уровень основного состояния пересекается с вышележащим триплетным, зависит от величины взаимодействия. Эта зависимость показана на рисунке 2.13. Критическое магнитное поле  $B_c(U)$  быстро убывает при увеличении электрон-электронного взаимодействия. При  $U \gg 1$ , значение  $B_c(U)$  асимптотически ведет себя как [152]

$$B_c(U) \sim \frac{5}{\pi U} \frac{E^*}{\mu_B}. \quad (2.55)$$

Благодаря этому становится возможным управлять синглет-триплетным переходом путем изменения величины электрон-электронного взаимодействия.

Пересечение термов, однако же, не гарантирует, что синглет-триплетный переход действительно произойдет. Для этого необходимы дополнительные спин-зависимые взаимодействия, которые замешали бы состояния с различными спинами. Подчеркнем, что дополнительное постоянное магнитное поле не приводит к желаемому эффекту, поскольку оно лишь поворачивает ось квантования спина. В качестве

подходящего взаимодействия мы рассматриваем спин-орбитальное взаимодействие, описываемое гамильтонианом (2.49). Оно приводит к анти-кроссингу термов с различными спинами. Щель в спектре  $\Delta$  в окрестности анти-кроссинга зависит от взаимной ориентации  $\alpha$  и  $\mathbf{B}$ . Этот феномен недавно изучался в эксперименте [155] для системы с непрерывным спектром. Помимо этого,  $\Delta$  зависит от  $U$ ,  $\alpha$  и  $B_c(U)$ .

В первом порядке по величине спин-орбитального взаимодействия щель в спектре в окрестности синглет-триплетного перехода определяется матричным элементом  $\langle \Psi^{(T)} | H_{\text{SOI}} | \Psi^{(S)} \rangle$ , причем угловая зависимость величины щели дается матричным элементом на спиновых волновых функциях. Легко показать, что

$$\Delta(\alpha, U, \theta) = \alpha |\sin \theta| \Delta(U), \quad (2.56)$$

где  $\theta$  — угол между  $\alpha$  и  $\mathbf{B}$ . Таким образом, щель максимальна, если  $\alpha$  и  $\mathbf{B}$  перпендикулярны.

Интегралы, определяющие  $\Delta(U)$ , берутся в квадратурах, но ответ оказывается довольно громоздким. Мы приведем здесь асимптотическое поведение  $\Delta(U)$  [152]:

$$\Delta(U) = \Delta^* \begin{cases} \frac{8}{3\pi} - \frac{193U}{135\pi^2}, & U \rightarrow 0 \\ \frac{5(35 + 24\pi^2)}{36\sqrt{2}\pi^2 U} - \frac{25(7 + 12\pi^2)}{18\sqrt{2}\pi^3 U^2}, & U \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.57)$$

где масштаб энергии есть  $\Delta^* = E^*L/(\pi a_B)$ . Величина щели убывает с ростом  $U$ , как показано на рисунке 2.14.

### 2.3.2 Дальнодействие: точная диагонализация

В реалистической ситуации электрон-электронное взаимодействие распространяется на конечное расстояние. Очевидным следствием этого факта является рост триплетного терма с увеличением взаимодействия, что, в свою очередь, приводит к увеличению критического поля  $B_c$ . Мы исследовали синглет-триплетный переход в случае дальнодействующего взаимодействия.

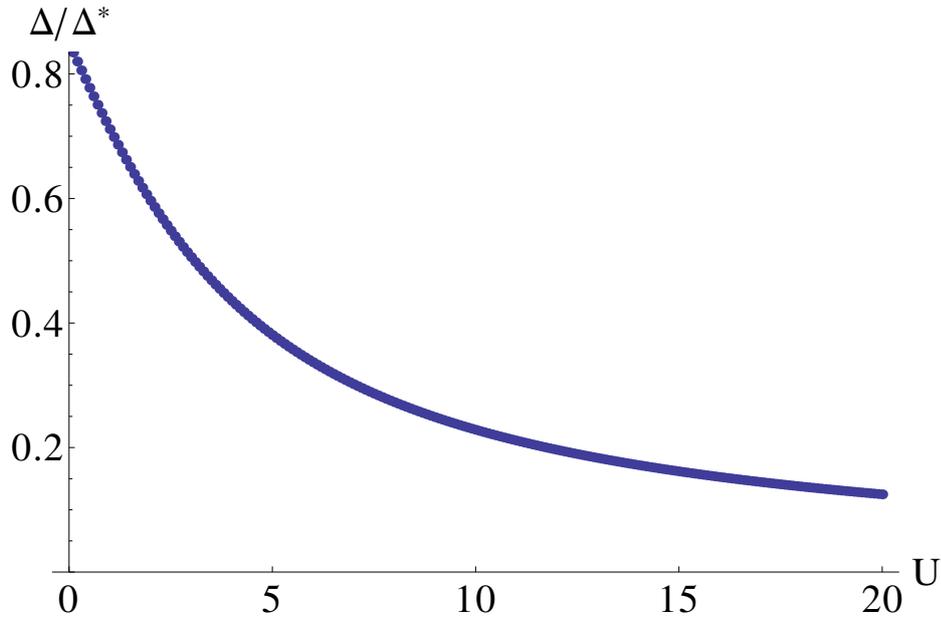


Рисунок 2.14 — Щель в спектре  $\Delta(U)$  в зависимости от взаимодействия.

Модельный потенциал электрон-электронного взаимодействия дается следующей функцией:

$$V(x_1, x_2) = V \frac{e^2}{2a} e^{-|x_1 - x_2|/a}. \quad (2.58)$$

Она переходит в  $\delta$ -функцию при  $a \rightarrow 0$ , и аппроксимирует дальноедействие при  $a > L$ . Дополнительно положим, что вектор  $\alpha$  направлен перпендикулярно к  $\mathbf{B}$  вдоль оси  $z$ .

Проблема решается с помощью метода точной диагонализации. Мы раскладываем многоэлектронную волновую функцию по слэтеровским детерминантам, построенным на одночастичных функциях  $\psi_{n,s}(x)$ , в качестве которых выбираются собственные функции гамильтониана

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{e^2 \alpha}{\hbar} p \sigma_z. \quad (2.59)$$

Эти функции имеют вид

$$\psi_{n,s}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \exp\left(\frac{i\alpha s x}{a_B}\right) \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \chi_s, \quad (2.60)$$

где  $\chi_s$  обозначает собственную функцию  $\sigma_z$ ,  $s = \pm 1$ ,  $n \in \mathbb{N}$ . Соответствующее собственное значение равно

$$\varepsilon_n = E^* \frac{n^2}{2} - \alpha^2 \frac{m e^4}{2 \hbar^2}. \quad (2.61)$$

Второй член, возникающий благодаря спин-орбитальному взаимодействию, не зависит от одночастичных квантовых чисел, и потому не приводит к расщеплению спиновых подзон.

Матрица гамильтониана, подлежащая диагонализации, содержит матричные элементы потенциала электрон-электронного взаимодействия и магнитного поля, вычисленные на волновых функциях из уравнения (2.60).

Матричные элементы потенциала электрон-электронного взаимодействия равны

$$\begin{aligned} \langle l, s_l; n, s_n | \hat{V} | k, s_k; m, s_m \rangle = & \frac{Ve^2 a}{4L^2} \left( \delta_{s_l, s_k} \delta_{s_n, s_m} \sum \pm f(\pm l, \pm n, \pm k, \pm m) \right. \\ & \left. - \delta_{s_l, s_m} \delta_{s_k, s_n} \sum \pm f(\pm n, \pm l, \pm k, \pm m) \right), \end{aligned} \quad (2.62)$$

где суммирование производится по всем возможным комбинациям знаков перед квантовыми числами, причем перед функцией  $f$  берется “+” в случае четного числа положительных аргументов, и “-” в противном случае. Функция  $f$  выражается через вспомогательную функцию  $g$  как  $f(l, n, k, m) = g(l + k, n + m)$ , где  $g(p, q) = 0$  для нечетных значений  $(p + q)$ , в то время как для четных значений  $(p + q)$  она равна

$$g(p, q) = \frac{[e^{-L/a}(-1)^p - 1](1 + \frac{\pi^2 a^2}{L^2} pq)}{(1 + \frac{\pi^2 a^2}{L^2} p^2)(1 + \frac{\pi^2 a^2}{L^2} q^2)} + \frac{\delta_{p, -q} L/a}{1 + \frac{\pi^2 a^2}{L^2} p^2}. \quad (2.63)$$

Важная особенность матричных элементов электрон-электронное взаимодействия состоит в том, что они не зависят от параметра спин-орбитального взаимодействия  $\alpha$ . Следовательно, спин-орбитальное взаимодействие в отсутствие магнитного поля не меняет энергетического спектра системы, помимо одинакового для всех термов сдвига, а также, в соответствии с уравнением (2.60), не изменяет распределение электронной плотности.

Напротив, матричные элементы магнитного поля существенно зависят от  $\alpha$ ,

$$H_{k_1, s_1; k_2, s_2} = g \frac{\hbar \omega_B}{8\pi} \delta_{s_1, -s_2} [h_{s_2}(k_1 - k_2) + h_{s_2}(k_2 - k_1) - h_{s_2}(k_1 + k_2) - h_{s_2}(-k_1 - k_2)], \quad (2.64)$$

где

$$h_{s_2}(k) = \begin{cases} \frac{e^{2i\pi s_2 \tilde{\alpha}} (-1)^k - 1}{i(k + 2s_2 \tilde{\alpha})}, & \tilde{\alpha} \neq -\frac{k}{2s_2} \\ \pi, & \tilde{\alpha} = -\frac{k}{2s_2} \end{cases} \quad (2.65)$$

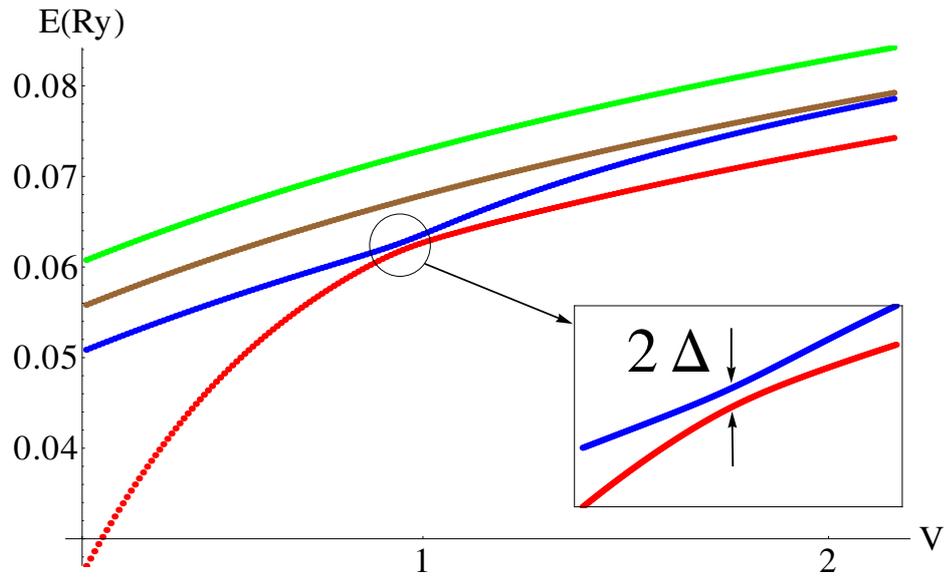


Рисунок 2.15 — Основное состояние и первые возбужденные триплетные уровни в зависимости от амплитуды электрон-электронное взаимодействия  $V$ . На вставке показан антикроссинг уровней вблизи синглет-триплетного перехода. Параметры системы:  $L = 30a_B$ ,  $a = 0.1L$ ,  $\hbar\omega_B = 10^{-3}Ry$ ,  $g = -10$ ,  $\alpha = 0.01$ .

и обозначено  $\tilde{\alpha} = \alpha L / \pi a_B$ . Таким образом, поведение системы кардинально меняется только когда магнитное поле и спин-орбитальное взаимодействие присутствуют одновременно.

Первые четыре терма энергетического спектра в зависимости от величины взаимодействия представлены на рисунке 2.15. Видно, что взаимодействие конечного радиуса не служит препятствием для возникновения синглет-триплетного перехода, хотя критическое магнитное поле несколько возрастает.

Рисунок 2.16 показывает зависимость спина основного состояния от величины электрон-электронного взаимодействия  $V$  при переходе через точку синглет-триплетного перехода при фиксированном магнитном поле. Этот результат напрямую демонстрирует возможность переключения между различными спиновыми состояниями путем чисто электрического воздействия на систему.

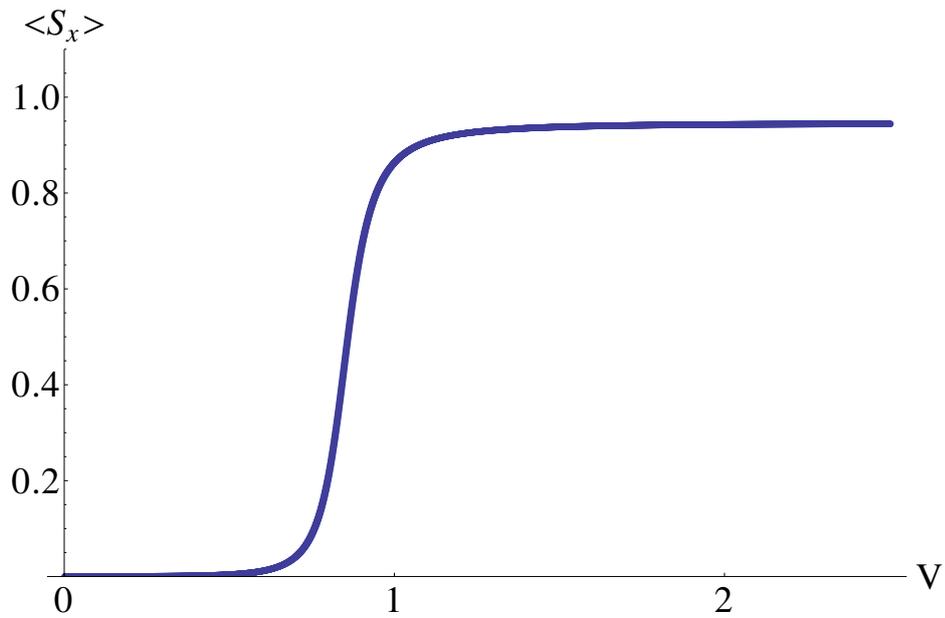


Рисунок 2.16 — Проекция спина основного состояния  $\langle S_x \rangle$  как функция  $V$  в окрестности синглет-триплетного перехода [152]. Параметры системы те же, что и на рисунке 2.15.

## 2.4 Зондовая манипуляция спином электронов в одномерных квантовых точках

В этом разделе мы исследуем проблему управления спином электронов в одномерной квантовой точке, содержащей четное число электронов с нулевым полным спином, при помощи заряженного острия СЗМ [156]. Мы рассматриваем квантовую точку, изолированную от резервуаров, с тем чтобы избежать паразитных эффектов, таких как фотонно-стимулированное прохождение электронов, обыкновенно сопровождающих манипуляцию спином [123]. Мы исследовали эволюцию электронной зарядовой и спиновой плотности при изменении положения зонда и его потенциала.

Манипуляция спином становится возможной благодаря совместному эффекту сильного электрон-электронного взаимодействия и большого потенциала зонда в присутствии внешнего магнитного поля, превосходящего определенную критическую величину  $V_c$ . Потенциал зонда разделяет одномерную квантовую точку на две туннельно связанные квантовые ямы. Кулоновское отталкивание между электронами, занимающими одну яму, создает сильные хаббардовские корреляции, благодаря

которым электрон, занявший более узкую яму со спином, параллельным  $B$ , блокирует электроны с противоположным спином в соседней яме. Вследствие электрон-электронного взаимодействия в электронной системе формируется вигнеровская молекула [71; 157], в энергетическом спектре которой происходит сближение термов состояний с различной спиновой структурой [14], что сильно уменьшает значение  $B_c$  [152]. В переходных областях спиновая текстура определяется спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, порожденным электрическим полем заряженного острия.

Метод точной диагонализации позволяет найти решение этой задачи для любой величины электрон-электронного взаимодействия и произвольного положения зонда. Мы установили, что смещение зонда вдоль одномерной квантовой точки приводит к резкому переключению спинового состояния электронной системы между поляризованным и неполяризованным. В области перехода между поляризованным и неполяризованным состоянием возникает прецессия спина, в то время как пространственное распределение зарядовой плотности электронов остается практически неизменным.

Для определенности, рассмотрим одномерную квантовую точку, содержащую четыре электрона, в присутствии заряженного зонда. Одномерная квантовая точка вытянута вдоль оси  $x$ , волновая функция  $\Psi$  подчиняется нулевым граничным условиям на концах системы при  $x = 0$  и  $x = L$ . Магнитное поле  $B$  направлено вдоль оси  $z$ . Гамильтониан системы равен

$$H = \sum_{i=1}^4 \left[ \frac{p_{x_i}^2}{2m} + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_{z_i} - e (\phi_{\text{pr}}(x_i) + V(x_i)) \right] + \sum_{i>j} U(x_i - x_j) + H_{\text{SOI}}, \quad (2.66)$$

где  $p_{x_i}$  есть импульс  $i$ -го электрона,  $\sigma_z$  — это матрица Паули,  $g$  обозначает эффективный фактор Ланде. Потенциал кулоновского электрон-электронное взаимодействия аппроксимирован формулой

$$U(x_1 - x_2) = \frac{U}{\epsilon} \frac{e^2}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + a^2}}, \quad (2.67)$$

где  $\epsilon$  есть диэлектрическая проницаемость,  $a$  — диаметр квантовой точки, а  $U$  есть безразмерная амплитуда взаимодействия, которая введена как свободный

параметр с целью изучения влияния электрон-электронного взаимодействия на спиновую структуру ( $U = 1$ , если не оговорено иное). Потенциал электрон-ионного взаимодействия  $V(x)$  определяется в модели желе по парному потенциалу  $U(x_1 - x_2)$ . Потенциал зонда в одномерной квантовой точке равен

$$\phi_{\text{pr}}(x) = \frac{Q}{\varepsilon} [(x - x_0)^2 + z_0^2]^{-1/2}, \quad (2.68)$$

где  $(x_0, 0, z_0)$  суть координаты зонда, а  $Q$  — его заряд. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия равен

$$H_{\text{SOI}} = \frac{\alpha}{\hbar} \sum_{i=1}^4 \frac{1}{2} (E_z(x_i) p_{x_i} + p_{x_i} E_z(x_i)) \sigma_{y_i}, \quad (2.69)$$

где  $\alpha$  есть параметр спин-орбитального взаимодействия,  $E_z(x)$  —  $z$ -компонента электрического поля зонда.

Волновая функция основного состояния  $\Psi$  находится точной диагонализацией гамильтониана (2.66). Компоненты спиновой плотности, в единицах  $\hbar/2$ , определяются выражениями  $s_\gamma(x) = \langle \sum_{i=1}^4 \sigma_{\gamma_i} \delta(x - x_i) \rangle$ , где  $\gamma \in \{x, y, z\}$ , среднее берется на основном состоянии. Нулевые граничные условия влекут  $s_y(x) = 0$ .

Параметры системы взяты для квантовых точек на основе InAs, а именно,  $\alpha = 117 \text{ e}\text{\AA}^2$ , эффективная масса  $m = 0.0265 m_0$ , статическая диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon = 15$ , боровский радиус  $a_B = 300 \text{ \AA}$  [158]. Фактор Ланде берется для объемного материала  $g = -15$  [159]. Длина системы  $L = 900 \text{ \AA}$ , заряд зонда  $Q = 5e$ , высота острия зонда над квантовым проводом  $z_{\text{probe}} = 50 \text{ \AA}$ , магнитное поле  $B = 0.44 \text{ Т}$ , что отвечает циклотронной частоте  $\hbar\omega_c = 0.024E_0$ , где  $E_0 = 1.72 \text{ meV}$  есть продольная энергия размерного квантования.

Пространственное распределение электронной плотности вдоль квантового провода показано на рисунке 2.17 для четырех положений заряженного зонда. Когда зонд расположен вблизи левого края одномерной квантовой точки, электроны в системе благодаря кулоновскому отталкиванию формируют вигнеровскую молекулу. При небольшом перемещении зонда вправо, электроны остаются в правом сегменте одномерной квантовой точки, причем компоненты спиновой плотности близки к нулю. При определенном критическом положении зонда ( $x_0 \approx 0.27L$  при

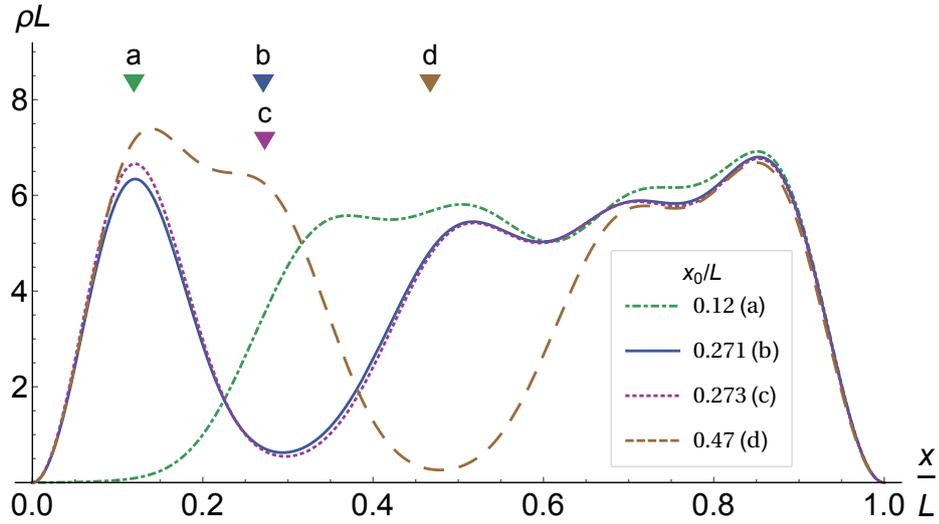


Рисунок 2.17 — Пространственное распределение электронной зарядовой плотности в одномерной квантовой точке, находящейся под действием заряженного зонда, для различных положений зонда  $x_0$ , указанных на вставке и обозначенных соответствующим треугольничком [156].

рассматриваемых параметрах) первый электрон перескакивает в сегмент квантовой точки, расположенный слева от зонда. Этот переход сопровождается спонтанным возникновением  $z$ -компоненты спиновой плотности, которая достигает максимальной амплитуды по мере движения зонда к правой границе квантовой точки, как видно из рисунка 2.18а. Переключение спинового состояния происходит в узком диапазоне положений зонда, оценка для ширины которого  $\delta x_0$  есть  $(m x_0^3 / \hbar^2) \Delta_{\text{SOI}}$ . Подчеркнем, что зарядовая плотность  $\rho(x)$  остается практически неизменной в области перехода (см. кривые (b) и (c) на рисунках 2.17 и 2.18), что отражает спин-зарядовое разделение в одномерной системе.

Возникновение спиновой компоненты  $s_z(x)$  при критическом положении зонда сопровождается появлением  $x$ -компоненты электронной плотности  $s_x(x)$ , как показано на рисунке 2.18b. Отметим, что  $s_x(x)$  отлична от нуля лишь в переходной области положений зонда шириной  $\delta x_0$ . Напротив, компонента  $s_z(x)$  существует в широкой полосе  $\Delta x_0$ , величина которой зависит от амплитуды электрон-электронного взаимодействия и магнитного поля. Эта полоса соответствует состоянию, в котором один электрон со спином вдоль оси  $z$  локализован в одной из квантовых ям (более узкой из двух). Границы полосы определяются балансом энергии при изменении

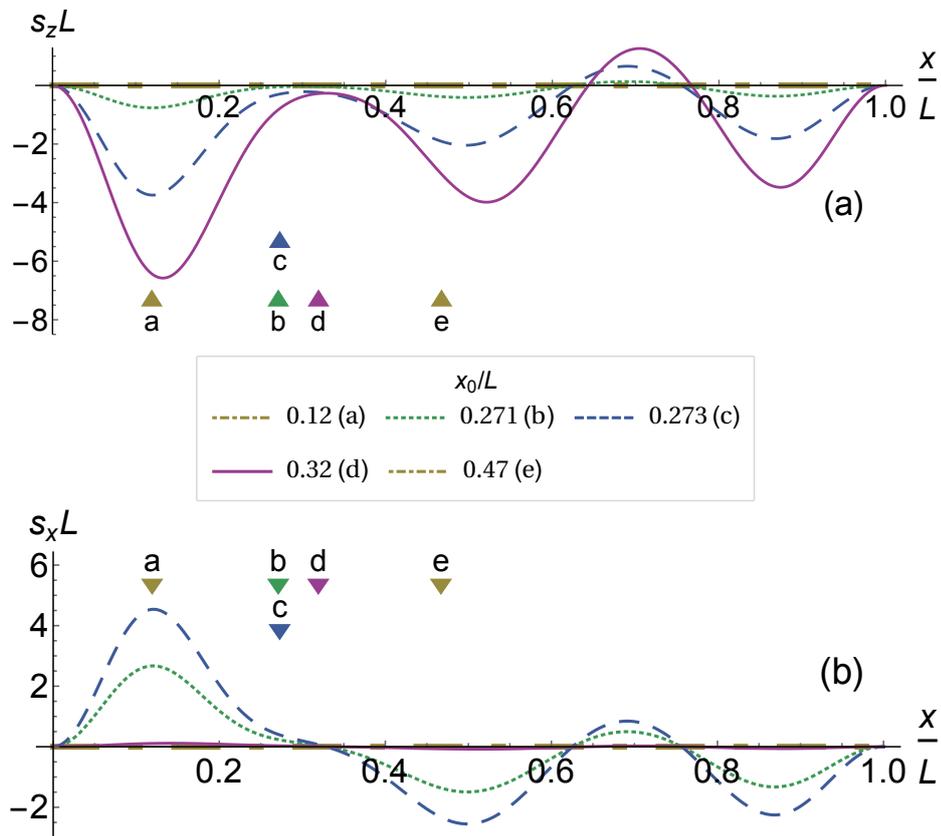


Рисунок 2.18 — Пространственная зависимость  $z$ -компоненты (a) и  $x$ -компоненты (b) спиновой плотности для различных положений зонда  $x_0$  [156].

положения зонда. Изменение кинетической энергии при локализации электрона в одной из ям компенсируется выигрышем в энергии кулоновского взаимодействия и энергии спина в магнитном поле. Три остальных электрона остаются локализованными в более широкой квантовой яме. Они проявляют антиферромагнитное упорядочение, в то время как между локализованным электроном и его соседом возникает ферромагнитная корреляция (рисунок 2.18a).

При последующем увеличении  $x_0$  уже второй электрон проскакивает под зондом в левую часть одномерной квантовой точки, как показано штриховой линией (d) на рисунке 2.17. Этот электрон несет спин, в точности компенсирующий спин локализованного электрона, так что спин в каждой квантовой яме слева и справа от зонда обращается в нуль, в соответствии с теоремой Либба-Маттиса. В конце первой зоны, в которой  $s_z(x) \neq 0$ , снова возникает компонента  $s_x(x)$  в узкой полосе положений зонда.

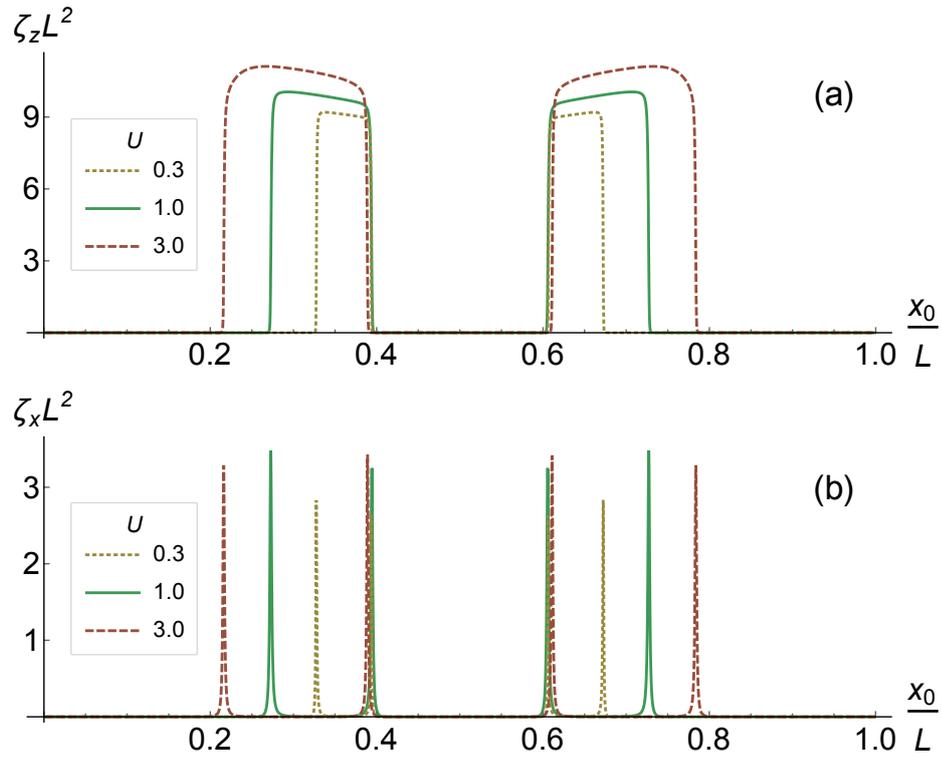


Рисунок 2.19 — Зависимость  $\zeta_z$  (a) и  $\zeta_x$  (b) от положения зонда для различных значений амплитуды электрон-электронного взаимодействия  $U$  [156].

Наиболее показательной характеристикой возникновения и эволюции компонент спиновой плотности служит интеграл от квадрата спиновой плотности по длине системы:  $\zeta_\gamma(x_0) = \int_0^L dx s_\gamma^2(x)$ ,  $\gamma \in \{x, z\}$ . Рисунок 2.19 показывает его зависимость от положения зонда  $x_0$  для трех значений параметра электрон-электронного взаимодействия  $U$ . X-компонента имеет форму четырех узких пиков шириной  $\delta x_0$ . Каждый пик отвечает переходу очередного электрона с одной стороны зонда на другую. Существуют две зоны спиновой поляризации вдоль оси  $z$ . При этом ширина поляризационных зон, а равно и амплитуда поляризации, сильно зависит от величины электрон-электронного взаимодействия, обращаясь в нуль при его уменьшении.

Переключение между различными спиновыми состояниями есть ближайший аналог синглет-триплетного перехода. Рисунок 2.20 показывает зависимость энергетической щели между основным состоянием и первым возбужденным состоянием, которое отличается от основного по спиновой структуре, в зависимости от положения зонда. Четыре критических положения  $x_0$ , при которых расщепление уровней

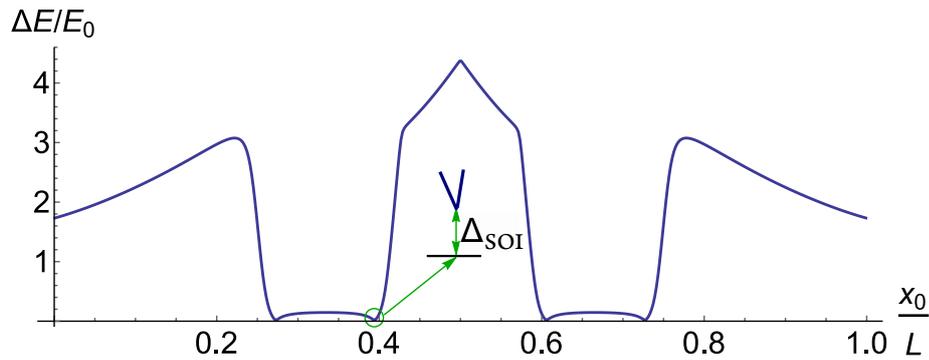


Рисунок 2.20 — Энергетическая щель между основным и первым возбужденным состоянием в многочастичном электронном спектре как функция положения зонда  $x_0$ . Вставка показывает расщепление уровней  $\Delta_{SOI}$  в окрестности антикроссинга термов.

падает до значения  $\Delta_{SOI} \approx 0.03 \text{ meV}$ , отвечают четырем электронным переходам из квантовых ям с одной стороны зонда на другую.

Значение  $\Delta_{SOI}$  определяет энергетическую щель, которая защищает состояние с определенным электронным спином в непосредственной окрестности синглет-триплетного перехода, однако в центре зоны поляризации основное, спин-поляризованное, состояние отделено от ближайшего возбужденного неполяризованного состояния энергетической щелью, равной сумме обменной и зеемановской энергий. Для нашей системы эта щель на порядок больше, чем  $\Delta_{SOI}$ .

Щель  $\Delta_{SOI}$  зависит от величины электрон-электронного взаимодействия. Анализ этой зависимости нетрудно провести в непосредственной близости к точке перехода. Ниже мы изложим аналитическую модель, которая позволяет вычислить  $\Delta_{SOI}$  и спиновую плотность для произвольной величины электрон-электронного взаимодействия [156]. В модели рассматривается двухэлектронная задача, однако выводы ее применимы и к системам с большим числом частиц, поскольку наиболее важные электронные корреляции формируются двумя электронами с высоких уровней энергии, в то время как остальные электроны с глубоких уровней испытывают слабое возмущение в окрестности перехода. Результаты, полученные с помощью этой простой модели, качественно согласуются с представленными выше результатами точной диагонализации для многочастичной задачи.

Одночастичный гамильтониан есть  $H_{1p} = -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \phi_{pr}(x)$ , где потенциал зонда  $\phi_{pr}(x)$  локализован вблизи  $x = 0$ . При  $x = -L_1$  и  $x = L_2$  на волновую функцию накладываются нулевые граничные условия. Мы ограничимся двухуровневой моделью с термами  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ . Мы считаем, что соответствующие одночастичные состояния  $\phi_1(x)$  и  $\phi_2(x)$  локализованы по разные стороны зонда, что соответствует расположению зонда вблизи центра системы, причем  $\epsilon_1 < \epsilon_2$ . Волновые функции ортонормированны. Параметры системы таковы, что система находится в окрестности синглет-триплетного перехода.

В отсутствие электрон-электронного взаимодействия, основное состояние системы есть  $\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)\chi_S$ , где  $\chi_S$  обозначает синглетную спиновую волновую функцию. Найдем теперь двухчастичную волновую функцию взаимодействующей системы. Пробная волновая функция синглетного состояния есть [156]

$$\Psi_S(x_1, x_2) = [a(\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)) + b\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)] \chi_S, \quad (2.70)$$

где коэффициенты  $a$  и  $b$  подлежат определению из минимизации вариационной энергии для гамильтониана со взаимодействием  $H = \sum H_{1p} + U(x_1 - x_2)$ . Они равны

$$\begin{cases} a = -\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1 - \frac{A}{\sqrt{A^2 + 2}}} \\ b = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1 + \frac{A}{\sqrt{A^2 + 2}}}, \end{cases} \quad (2.71)$$

где обозначено  $A = (\epsilon_2 - \epsilon_1 + J_1 - J_0)/J_2$ . Интегралы перекрытия  $J_i$  даны ниже. Наибольший из них

$$J_0 = \int_{-L_1}^{L_2} dx_1 dx_2 U(x_1 - x_2) \rho_1(x_1) \rho_1(x_2) \quad (2.72)$$

отвечает взаимодействию “на одном узле” и нечувствителен к перекрытию электронной плотности между ямами. Оставшиеся интегралы взаимодействия

$$J_1 = \int_{-L_1}^{L_2} dx_1 dx_2 U(x_1 - x_2) (\rho_1(x_1)\rho_2(x_2) + \phi_1(x_1)\phi_2(x_1)\phi_1(x_2)\phi_2(x_2)), \quad (2.73)$$

$$J_2 = 2 \int_{-L_1}^{L_2} dx_1 dx_2 U(x_1 - x_2) \rho_1(x_1)\phi_1(x_2)\phi_2(x_2) \quad (2.74)$$

и

$$J_3 = \int_{-L_1}^{L_2} dx_1 dx_2 U(x_1 - x_2) (\rho_1(x_1)\rho_2(x_2) - \phi_1(x_1)\phi_2(x_1)\phi_1(x_2)\phi_2(x_2)) \quad (2.75)$$

малы в меру малости перекрытия.

Энергия основного состояния равна

$$\epsilon_S = 2\epsilon_1 + J_0 + \frac{1}{2} \left( \epsilon_2 - \epsilon_1 + J_1 - J_0 - \sqrt{(\epsilon_2 - \epsilon_1 + J_1 - J_0)^2 + 2J_2^2} \right). \quad (2.76)$$

Волновая функция триплетного состояния имеет вид

$$\Psi_T(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)) \chi_T, \quad (2.77)$$

где  $\chi_T$  обозначает спиновые функции триплетных состояний,  $|T_0\rangle = |S = 1, S_z = 0\rangle$  или  $|T_{\pm}\rangle = |1, \pm 1\rangle$ . Энергии триплетных состояний равны

$$\epsilon_T = \epsilon_1 + \epsilon_2 + J_3 \pm B. \quad (2.78)$$

В отсутствие спин-орбитального взаимодействия, синглет-триплетный переход соответствует пересечению термов  $\epsilon_S$  и  $\epsilon_T$ . В окрестность синглет-триплетного перехода систему можно привести путем изменения амплитуды парного взаимодействия  $U$ . Как отмечалось в предыдущей секции, в силу различной симметрии орбитальных волновых функций электрон-электронное взаимодействие вносит различный вклад в энергию синглетных и триплетных состояний, причем это приводит к уменьшению расстояния между этими уровнями энергии. Вариация  $U$  осуществима в электростатически сформированных квантовых точках путем усиления поперечного конфайнмента за счет изменения потенциалов близлежащих затворов.

Энергетический спектр нашей модели как функция  $U$  представлен на рисунке 2.21. По мере увеличения  $U$  сначала наблюдается близкий к линейному рост энергии синглетного терма. Это соответствует постепенному заполнению состояния  $\phi_2(x)$ . Когда это состояние полностью заполнится, передислокация электрона из левого в правый сегмент квантовой точки будет завершена. Уместно подчеркнуть, что переход одного электрона из одной квантовой ямы в другую есть характерное проявление электрон-электронного взаимодействия, поскольку в невзаимодействующей системе электроны переходят парами. Синглетный терм постепенно

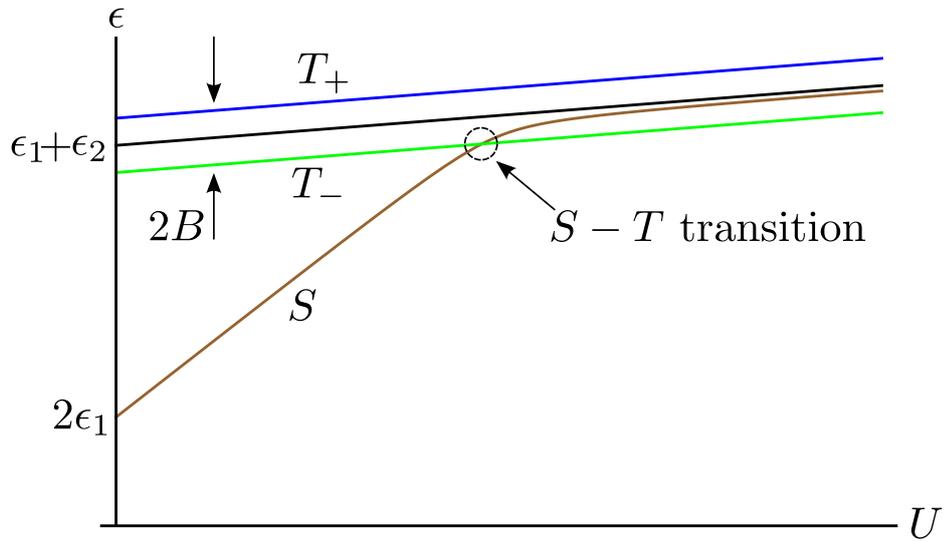


Рисунок 2.21 — Энергетический спектр модели в зависимости от величины электрон-электронного взаимодействия.

приближается к терму  $T_0$  с увеличением  $U$  и пересекает терм  $T_-$ , если магнитное поле превосходит критическое значение  $B_c$ . Возникает спиновая поляризация вдоль направления  $B$ , причем переход в спин-поляризованное состояние происходит резко, то есть пороговым образом по  $U$ . Уравнения (2.76) и (2.78) задают критические значения параметров системы и ширину зоны поляризации. Значение  $B_c$  можно сделать достаточно малым при сильном электрон-электронном взаимодействии, как видно из подписи к рисунку 2.22.

Теперь примем во внимание спин-орбитальное взаимодействие (2.69) в первом порядке теории возмущений. Его матричные элементы отличны от нуля только между состояниями  $|S\rangle$  и  $|T_{\pm}\rangle$ , так что основное состояние представляет собой линейную комбинацию этих трех. При  $B = 0$  вклады состояний  $|T_{\pm}\rangle$  в спиновую плотность сокращаются друг с другом, поэтому, с технической точки зрения, в отсутствие магнитного поля в системе нет спинового отклика. Разумеется, его не должно быть и из общих соображений, поскольку гамильтониан, соблюдающий симметрию по отношению к обращению времени, приводит к нулевым средним значениям спиновой плотности в невырожденном основном состоянии с целым полным спином. Однако, для осуществления синглет-триплетного перехода необходимо приложить конечное магнитное поле  $B_c$ , которое сдвинет состояние  $|T_+\rangle$  вверх по энергии, и мы

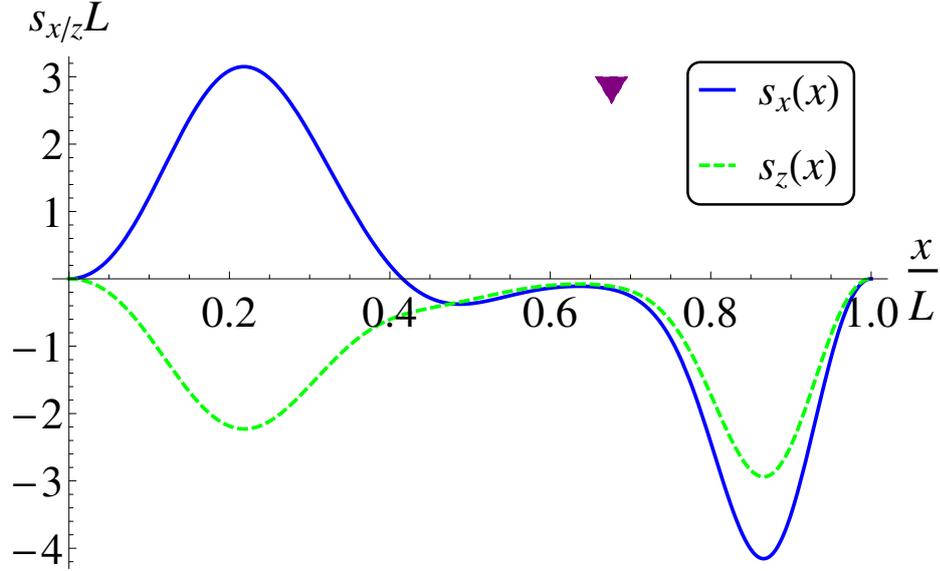


Рисунок 2.22 — Результаты точной диагонализации для спиновых компонент плотности в одномерной квантовой точке с двумя электронами. Параметры систем таковы: длина системы  $L = 40a_B$ , заряд зонда  $Q = e$ , положение зонда  $x_0 = 0.676L$ , высота зонда над квантовой точкой  $z_0 = 4a_B$ , магнитное поле  $B = 3.6 \mu\text{T}$ , что отвечает циклотронной частоте  $\hbar\omega_c = 4 \cdot 10^{-5}E_0$ , где энергия продольного квантования равна  $E_0 = 9.7 \mu\text{eV}$ .

будем иметь дело с двухуровневой моделью с матричным элементом

$$\langle T_- | H_{\text{SOI}} | S \rangle = \frac{\alpha b}{2} \int_{-L_1}^{L_2} dx E_z(x) (\phi_1(x)\phi_2'(x) - \phi_1'(x)\phi_2(x)). \quad (2.79)$$

Расстояние между уровнями равно

$$\Delta E_{\text{ST}} = \sqrt{(\epsilon_{T_-} - \epsilon_S)^2 + 4|\langle T_- | H_{\text{SOI}} | S \rangle|^2}. \quad (2.80)$$

Синглет-триплетное расщепление уровней  $\Delta_{\text{SOI}}$  определяется как минимальное значение  $\Delta E_{\text{ST}}$ . Оно достигается при  $\epsilon_{T_-} \approx \epsilon_S$  и равно

$$\Delta_{\text{SOI}} = 2|\langle T_- | H_{\text{SOI}} | S \rangle|. \quad (2.81)$$

Эта формула вместе с уравнением (2.79) показывает что  $\Delta_{\text{SOI}}$  зависит от положения зонда и величины электрон-электронного взаимодействия через коэффициент  $b$ . При увеличении парного взаимодействия  $b$  уменьшается, так что при  $U \rightarrow \infty$  синглет-триплетное расщепление исчезает, как и в задаче из предыдущего раздела [152].

Найдем распределение спиновой плотности, чтобы сравнить его с результатами точной диагонализации. При учете спин-орбитального взаимодействия, основное

состояние принимает вид

$$\Psi_{\text{GS}}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{c^2 + 1}} (\Psi_{\text{S}}(x_1, x_2) + c\Psi_{\text{T}_-}(x_1, x_2)), \quad (2.82)$$

где

$$c = \frac{\epsilon_{\text{T}_-} - \epsilon_{\text{S}} - \Delta E_{\text{ST}}}{\Delta_{\text{SOI}}}. \quad (2.83)$$

Компоненты спиновой плотности суть [156]

$$s_x(x) = A_x (\rho_1(x) - \rho_2(x)) \quad (2.84)$$

и

$$s_z(x) = -A_z (\rho_1(x) + \rho_2(x)), \quad (2.85)$$

где  $\rho_i(x) = |\phi_i(x)|^2$ ,  $i = \overline{1,2}$ , есть одночастичная плотность. Тот факт, что  $z$ -компонента спиновой плотности повторяет профиль плотности заряда  $\rho_1(x) + \rho_2(x)$ , вполне ожидаем для полностью поляризованного состояния. Менее очевидно, что антисимметричная комбинация  $\rho_1(x) - \rho_2(x)$  должна определять профиль  $s_x(x)$ , однако и это хорошо согласуется с результатами точной диагонализации, представленными на рисунке 2.22.

Амплитуда  $A_x = 2ac/(c^2 + 1)$  как функция  $U$  имеет пик с максимумом  $1/\sqrt{2}$  в окрестности синглет-триплетного перехода. Ширина пика определяется величиной  $\Delta_{\text{SOI}}$  из уравнений (2.79), (2.81). Амплитуда  $A_z = c^2/(c^2 + 1)$  имеет резкую пороговую зависимость от  $U$ , возрастая от 0 до 1 в окрестности синглет-триплетного перехода, причем выход ее на насыщение знаменует начало области поляризации вдоль оси  $z$ . Форма этой ступеньки сглаживается за счет спин-орбитального взаимодействия. Эти выводы качественно согласуются и с результатами точной диагонализации для четырех электронов.

Во всех предыдущих рассуждениях пренебрегалось взаимодействием электронов с ядрами. Описанный здесь механизм управления спином электронов устойчив к такому взаимодействию при условии, что характерные энергии, связанные с флуктуациями поля Оверхаузера  $\delta B_n$  и с разностью значений этого поля  $\Delta B_n$  между поляризованным и неполяризованным состоянием, меньше, чем разность энергий между поляризованным и неполяризованным состоянием. Оценкой снизу для

этой величины служит энергетическая щель, защищающая основное состояние. Ее можно оценить в центре зон спиновой поляризации. Это условие выполняется в нашей системе, коль скоро величины флуктуаций поля лежат в диапазоне  $\delta B_n, \Delta B_n \sim 10 - 10^2$  мТ [160].

## 2.5 Заключение

В этой главе исследовалось сильно коррелированное состояние, которое формируется взаимодействующими электронами в одномерной квантовой точке. Для его изучения широко применялся метод точной диагонализации, который позволяет учесть сильное электрон-электронное и спин-орбитальное взаимодействие без введения каких-либо модельных ограничений при их описании. Результаты аналитических подходов сравнивались с методом точной диагонализации как с референсным.

В разделе 2.2 рассматривалось основное состояние бесспиновых электронов, взаимодействие которых между собой приводит к вигнеровскому упорядочению, то есть к сильным короткомасштабным корреляциям. Для его описания детально исследованы функция распределения электронов по одночастичным состояниям и фурье-спектр пространственного распределения электронной плотности. Найдено, что функция распределения содержит неожиданный дельта-пик на фермиевском импульсе, а фурье-спектр плотности имеет пороговую зависимость от импульса со скачком на  $2k_F$ . Эти эффекты оказались устойчивыми по отношению к изменению длины системы, числа электронов, радиуса и амплитуды взаимодействия, что дает нам основания полагать, что они отражают универсальные свойства ограниченных одномерных систем. Мы предложили простую модель, которая показала, что найденные особенности отражают формирование вигнеровской молекулы в одномерной квантовой точке. Сравнение точных результатов с теорией ограниченной латтинджерской жидкости показало, что последняя неправильно описывает функцию распределения и фурье-спектр плотности. Теория ограниченной латтинджерской

жидкости переоценивает деформацию вигнеровского кристалла за счет границ, поскольку вводит в одномерную систему избыточный положительный заряд, который притягивает электроны к центру системы. Эта проблема — плата за использование оператора электронной плотности, который не сохраняет число частиц и тем самым нарушает полную электронейтральность системы. Мы получили оператор плотности, лишенный указанного недостатка, нашли связанные с этим поправки к гамильтониану системы и вычислили наблюдаемые, которые оказались в полном согласии с результатами точной диагонализации.

В разделе 2.3 были изучены синглет-триплетные переходы в системе, состоящей из двух электронов в одномерной квантовой точке. Показано, что синглет-триплетные переходы возникают только благодаря совместному действию спин-орбитального взаимодействия и магнитного поля. Щель в энергетическом спектре в окрестности синглет-триплетного перехода зависит от взаимной ориентации внешнего магнитного поля и эффективного магнитного поля спин-орбитального взаимодействия. Наиболее интересный эффект связан с электрон-электронным взаимодействием, которое можно контролировать с помощью близлежащих затворов. Было показано, что увеличение взаимодействия приводит к существенному уменьшению критического магнитного поля, при котором осуществляется переход, и к уменьшению щели в спектре.

В разделе 2.4 мы показали, что спиновым состоянием электронов в квантовой точке можно эффективно управлять при помощи заряженного острия сканирующего зондового микроскопа в присутствии внешнего магнитного поля. Анализ изменения пространственного распределения зарядовой и спиновой плотности в одномерной квантовой точке, содержащей четыре электрона, выявил наличие двух областей положений зонда, в которых одномерная квантовая точка приобретает спиновую поляризацию в направлении внешнего магнитного поля. При расположении зонда вне этих зон спиновая поляризация отсутствует. В узкой переходной области между поляризованным и неполяризованным состоянием возникает спиновая поляризация, направленная вдоль квантового провода. Спин-поляризованное состояние возникает благодаря совместному действию отрицательного потенциала зонда,

разделяющего одномерную квантовую точку на две туннельно-связанные квантовые ямы, и сильных Хаббардовских корреляция электронов в этих квантовых ямах. В силу кулоновского отталкивания, электрон, занимающий более узкую квантовую яму со спином, параллельным магнитному полю, блокирует электроны с противоположным спином в соседней квантовой яме. Ширина поляризационных зон определяется величиной электрон-электронного взаимодействия и магнитного поля. Спиновая структура в переходных областях, как и их ширина, напрямую зависит от Rashba-спин-орбитального взаимодействия, индуцированного электрическим полем заряженного зонда.

## Глава 3. Парное спин-орбитальное взаимодействие

### 3.1 Введение

Следующие две главы диссертации посвящены изучению электронных состояний и коллективных возбуждений, возникающих в низкоразмерных системах благодаря совместному действию сил кулоновского отталкивания между электронами и сил, связывающих спин электрона с орбитальным движением. В них будет исследовано образование устойчивых связанных электронных пар, являющихся композитными бозонами, способными переносить заряд и спин, формирование новых коллективных возбуждений и их проявления в транспортных свойствах. Новая физика в поведении рассмотренных систем основана на проявлениях спин-орбитального взаимодействия рашбовского типа непосредственно в электрон-электронном взаимодействии.

Понимание того, что парное взаимодействие между заряженными частицами определяется не только их зарядом и взаимным расстоянием, но также и их импульсами и спинами, возникло еще на этапе создания релятивистской квантовой механики [161–163]. Этому замечательному факту в физике конденсированного состояния на протяжении долгого времени не уделялось должного внимания. Применительно к физике конденсированного состояния достаточно воспользоваться результатами, полученными в квазирелятивистском пределе при малом отношении скорости частиц к скорости света, когда электроны описываются уравнением Шредингера-Паули. В этом случае электрон-электронное взаимодействие описывается гамильтонианом Брейта-Паули [42; 43], содержащим парное спин-орбитальное взаимодействие, зависящее от спинов и импульсов взаимодействующих электронов. Величина такого взаимодействия мала по параметру  $v/c$ , как и спин-орбитальное взаимодействие в одночастичном гамильтониане Шредингера-Паули. Однако в кристалле, как известно, спин-орбитальное взаимодействие сильно увеличивается из-за взаимо-

действия электронов с кристаллическим потенциалом [33; 164—167]. В результате спин-орбитальное взаимодействие, обусловленное внешним электрическим полем, оказывается значительно больше, чем в вакууме. В недавних работах [168—175] мы показали, что в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы [33] аналогично увеличивается и парное спин-орбитальное взаимодействие, которое в этом случае определяется кулоновским полем взаимодействующих электронов. Важной особенностью парного спин-орбитального взаимодействия, отличающей его от обычного рашбовского взаимодействия, является то обстоятельство, что оно существенным образом зависит от спинов и импульсов обеих взаимодействующих частиц, не говоря уже о более сложной пространственной зависимости величины взаимодействия.

Ключевой аспект парного спин-орбитального взаимодействия состоит в том, что оно создает притяжение между электронами, находящимися в определенных спиновых конфигурациях, привязанных к импульсам [168]. Электрон-электронное притяжение возникает вследствие хорошо известного факта, что чем больше электрическое поле, порождающее спин-орбитальное взаимодействие, тем ниже опускается дно зоны проводимости в электронном спектре. По мере приближения электронов друг к другу, возрастающее электрическое поле смещает зону проводимости вниз, что приводит к уменьшению энергии электрона с определенной спиновой ориентацией, а это и означает возникновение притяжения между электронами.

Ярким проявлением притягивающего парного спин-орбитального взаимодействия является образование связанных электронных пар, которое возникает для достаточно сильного взаимодействия, достижимого в современных материалах [171—174]. Мы установили, что имеются два типа связанных состояний, отличающиеся характером движения, порождающего притяжение электронов. Благодаря относительному движению образуются *релятивные* состояния, спектр и структура которых не зависят от движения центра масс. *Конвективные* связанные состояния, возникающие вследствие движения пары как целого, напротив, образуются только при достаточно большом импульсе пары. Их спектр и спиновая структура существенно зависят от величины этого импульса. Энергия связи в современных

материалах с гигантским спин-орбитальным взаимодействием, согласно нашим оценкам, находится на уровне нескольких мэВ, а ее величиной можно управлять чисто электрическими методами, например, путем изменения потенциала затвора.

В настоящей главе рассмотрен следующий круг вопросов. В разделе 3.2 мы выведем гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия в кристаллах из гамильтониана Брейта-Паули в  $k \cdot p$  приближении, и обсудим, при каких условиях и в каких материалах его вклад в электрон-электронное взаимодействие оказывается существенным. Конкретные формы, которые принимает гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия в актуальных низкоразмерных структурах в зависимости от конфигурации кулоновских полей в них, мы изучим в разделе 3.3. Теория образования связанных электронных пар дана в разделе 3.4.

## **3.2 Парное спин-орбитальное взаимодействие в физике конденсированного состояния**

Электроны в твердом теле, как известно, образуют очень богатую систему, в которой не только разыгрываются многие эффекты, предсказанные в релятивистской квантовой теории [176—178], но и возникает множество новых нетривиальных явлений, обусловленных реализацией самых разнообразных электронных состояний и зонных спектров, которые совсем недавно казались экзотическими. Это стало возможным благодаря открытиям новых материалов и достижениям в технологии создания наноструктур.

Достаточно упомянуть углеродные нанотрубки [179] и открытие графена [180], электроны в котором описываются моделью безмассовых дираковских фермионов, то есть реализуют (2+1)-мерную квантовую электродинамику [181; 182]. Бесщелевые дирако-подобные спектры возникают также в топологических изоляторах [15; 16; 183], вейлевских и дираковских полуметаллах [184; 185]. В этих системах обнаруживается множество нетривиальных явлений типа топологических фаз [36], хиральной

аномалии [186], кляйновского туннелирования [187], коллапса электронной волновой функции [188] и так далее.

Разнообразие электронных состояний и спектров своим происхождением во многом обязано наличию кристалла. Движение электронов в кристаллическом потенциале описывается, вообще говоря, релятивистским уравнением Дирака [189], но практически всегда для получения спектров любых материалов достаточно описания в квазирелятивистском приближении при малом отношении скорости электронов к скорости света. Такое приближение позволило, в частности, изучить движение электронов со спином, и открыло огромную область физики спиновых явлений в твердых телах [41].

Исторически первым является приближение Паули [190], в котором одночастичное уравнение Дирака с волновыми функциями в виде биспиноров сводится к уравнениям Шредингера-Паули для спиноров Паули,

$$\left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - eV + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} \right] \psi = \varepsilon\psi. \quad (3.1)$$

где  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  есть оператор импульса электрона,  $\boldsymbol{\sigma}$  есть вектор Паули,  $V$  есть внешний потенциал, а  $\mathbf{E} = -\nabla V$  — внешнее поле, которое чувствуют электроны. Получающиеся при этом релятивистские поправки включают в себя спин-орбитальное взаимодействие

$$H_{\text{SOI}} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.2)$$

а также релятивистскую поправку к оператору кинетической энергии и оператор Дарвина. Наибольший интерес вызывает спин-орбитальное взаимодействие, так как связь спина с орбитальным движением электронов приводит в кристаллах к драматической перестройке зонного спектра и состояний. Другие поправки не приводят к таким сильным эффектам и поэтому им уделяется значительно меньше внимания.

Проявления спин-орбитального взаимодействия в кристаллических твердых телах исследуются как путем расчетов электронных спектров на основе уравнений Шредингера-Паули [166], так и путем изучения динамики электронов во внешних полях [191]. Для дальнейшего нашего исследования наибольший интерес представляет именно динамика электронов. Она описывается в терминах огибающих

волновых функций с использованием  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  метода [167]. При таком подходе уравнения движения электронов имеют вид, подобный уравнению Шредингера-Паули, но в них возникают константы спин-орбитального взаимодействия, которые определяются свойствами конкретного материала.

### 3.2.1 Одночастичное спин-орбитальное взаимодействие

В низкоразмерных структурах разделяют два типа спин-орбитального взаимодействия, в зависимости от природы электрического поля  $\mathbf{E}$ , благодаря которому оно порождается. Спин-орбитальное взаимодействие может создаваться кристаллическим полем в материалах при отсутствии центра пространственной инверсии. Также спин-орбитальное взаимодействие может возникать под действием электрического поля, создаваемого внешними по отношению к кристаллическому полю источниками. В таком случае говорят о спин-орбитальном взаимодействии Рашбы [33–35; 192]. В полупроводниковых квантовых структурах основным источником такого поля является обычно потенциал, формирующий низкоразмерную электронную систему, если благодаря ему образуется асимметрия пространственной инверсии структуры.

Подчеркнем, что спин-орбитальное взаимодействие рашбовского типа создается и другими источниками. Важнейшую роль среди них играют примеси и структурные дефекты [193; 194]. Если электрическое поле, создаваемое дефектом, изменяется плавно на масштабе постоянной кристаллической решетки, то возникающее благодаря ему спин-орбитальное взаимодействие описывается аналогично рашбовскому [195–198]. Это обстоятельство лежит в основе теоретического описания примесного спинового эффекта Холла [39].

Отметим, что рашбовское спин-орбитальное взаимодействие лежит в основе великого множества нетривиальных эффектов, которые в последние годы находились в центре внимания исследователей. Это, например, майорановские фермионы [40; 199–203], особый интерес к которым связан с их потенциальными приложениями

в квантовых вычислениях [204; 205], проблема генерации и управления спином [37], а также спиновая интерференция, связанная с фазой Берри [38].

Гамильтониан рашбовского спин-орбитального взаимодействия представляется в виде

$$H_{\text{RSOI}} = \frac{\alpha}{\hbar} (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.3)$$

где  $\alpha$  есть эффективная константа спин-орбитального взаимодействия, величина которой превосходит значение аналогичной константы в вакууме на большой ( $10^4 \dots 10^6$ ) множитель, значение которого определяется кристаллическим потенциалом и свойствами зонных состояний.

### 3.2.2 Двухчастичное спин-орбитальное взаимодействие Брейта

Представленное одночастичное описание не дает, однако, полного представления о явлениях, которые возникают в низкоразмерных структурах благодаря спин-орбитальному взаимодействию, так как взаимодействие между электронами, как известно, может сильно изменить одночастичную картину [1; 28].

Первый вопрос, который возникает при подходе к изучению взаимодействующих электронных систем состоит в выяснении гамильтониана электрон-электронного взаимодействия. Обычно он решается просто, предполагая, что взаимодействие описывается кулоновским потенциалом. Мы предлагаем подойти к этой проблеме последовательно, подобно тому, как строился одночастичный гамильтониан в кристалле на основе релятивистского уравнения Дирака.

В релятивистской квантовой механике теория парного взаимодействия в квазирелятивистском пределе (т.е. во втором порядке по параметру  $v/c$ ) была построена Брейтом [161–163]. Парное взаимодействие описывается известным гамильтонианом

Брейта-Паули [42; 43]:

$$H = \sum_{k=0}^5 H_k, \quad (3.4)$$

$$H_0 = \sum_{i=1}^2 \left[ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{\text{nuc}}(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (3.5)$$

$$H_1 = - \sum_{i=1}^2 \frac{\mathbf{p}_i^4}{8m^3c^2}, \quad (3.6)$$

$$H_2 = - \frac{e^2}{2m^2c^2} \left[ \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2}{r_{12}} + \frac{(\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{p}_1)(\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{p}_2)}{r_{12}^3} \right], \quad (3.7)$$

$$H_3 = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \sum_{i \neq j} \left( \mathbf{E}_{ij} \times \mathbf{p}_i + \frac{2e}{r_{ij}^3} \mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_j \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_i, \quad (3.8)$$

$$H_4 = \frac{ie\hbar}{8m^2c^2} \sum_{i=1}^2 \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{E}_i, \quad (3.9)$$

$$H_5 = \frac{e^2\hbar^2}{4m^2c^2} \left[ -\frac{8\pi}{3} (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \delta(\mathbf{r}_{12}) + \frac{\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2}{r_{12}^3} - 3 \frac{(\mathbf{r}_{12} \cdot \boldsymbol{\sigma}_1)(\mathbf{r}_{12} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)}{r_{12}^5} \right]. \quad (3.10)$$

Помимо обычного кулоновского члена, содержащегося в  $H_0$ , он включает также релятивистскую поправку к кинетической энергии  $H_1$ , специфическое релятивистское взаимодействие орбитальных моментов электронов  $H_2$ , двухчастичный оператор спин-орбитального взаимодействия  $H_3$ , дарвиновский член  $H_4$ , и оператор взаимодействия электронных спинов  $H_5$ . Наибольший интерес опять же представляет спин-орбитальное взаимодействие, которое, однако, содержит теперь две компоненты:

$$H_{\text{SOI}} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \sum_{i \neq j} \left( \mathbf{E}_{ij} \times \mathbf{p}_i + \frac{2e}{r_{ij}^3} \mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_j \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_i. \quad (3.11)$$

Первая компонента спин-орбитального взаимодействия в уравнении (3.11) имеет такой же вид, как в уравнении Шредингера-Паули (3.2), с той только разницей, что в ней фигурирует поле кулоновского взаимодействия двух электронов  $\mathbf{E}_{ij}$  вместо внешнего поля. На каждый электрон действует спин-орбитальное взаимодействие, создаваемое электрическим полем другого электрона. Второе слагаемое описывает действие магнитного поля, создаваемого одним из движущихся электронов, на спин другого.

### 3.2.3 Парное спин-орбитальное взаимодействие в кристаллах

Гамильтониан Брейта-Паули можно применить к электронам в кристалле в рамках  $k \cdot p$  метода, предполагая, что электрическое поле  $\mathbf{E}_{ij}$  является плавным на масштабе постоянной решетки. При этом очевидно, что импульс  $\mathbf{p}$  перейдет в квазиимпульс, а кристаллическое поле перенормирует коэффициенты, которые приобретут зависимость от зонного спектра и базисных блоховских состояний. Чрезвычайно важно, что коэффициенты, возникающие перед первым (электрическим) и вторым (магнитным) членом в уравнении (3.11), оказываются совершенно разными. Отношение этих коэффициентов, вообще говоря, зависит от модели зонного спектра электронных состояний, но наши оценки показывают, что вклад второго, магнитного, слагаемого пренебрежимо мал.

Проще всего продемонстрировать это на модели Кейна  $8 \times 8$  [167; 206]. Электрическая компонента спин-орбитального воздействия второго электрона на первый равна

$$H_{\text{PSOI}} = \frac{\alpha}{\hbar} \sum_{i \neq j} (\mathbf{E}_{ij} \times \mathbf{p}_i) \cdot \boldsymbol{\sigma}_i, \quad (3.12)$$

где

$$\alpha = \frac{eP^2}{3} \left[ \frac{1}{E_0^2} - \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)^2} \right], \quad (3.13)$$

$E_0$  — щель в спектре,  $P$  — межзонный матричный элемент импульса,  $\Delta_0$  — спин-орбитальное расщепление [33]. Магнитная компонента равна

$$H_{\text{B}} = g^* \mu_{\text{B}} \sum_{i \neq j} \mathbf{B}_{ij} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i, \quad (3.14)$$

где  $\mu_{\text{B}}$  есть магнетон Бора, а эффективный  $g$ -фактор равен

$$g^* = g_0 - \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2} \frac{1}{3} \left[ \frac{1}{E_0} - \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right]. \quad (3.15)$$

Таким образом

$$\left| \frac{H_{\text{B}}}{H_{\text{PSOI}}} \right| \sim \frac{2E_0}{m^* c^2}, \quad (3.16)$$

где  $m^*$  — эффективная масса. Как видно, отношение магнитной компоненты к электрической чрезвычайно мало. Качественно результат сохраняется при любых реалистических предположениях о спектре.

Следовательно, гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия дается уравнением (3.12), причем  $\alpha$  есть константа материала того же порядка величины, что и рашбовская константа в уравнении (3.3). Парное спин-орбитальное взаимодействие можно интерпретировать как рашбовское взаимодействие, порожденное кулоновскими полями взаимодействующих электронов. Фундаментальное различие между ними состоит в том, что электрическое поле  $\mathbf{E}_{ij}$ , определяющее величину взаимодействия, зависит от координат обоих электронов и должно, тем самым, определяться самосогласованно в ходе решения квантово-механических уравнений движения, что хотя и осложняет исследование, но открывает широкое поле возможностей для возникновения множества качественно новых свойств системы взаимодействующих электронов и нетривиальных эффектов.

Вместе с тем, в литературе последнего времени парное спин-орбитальное взаимодействие исследовано очень слабо. Близкая по существу идея о спин-орбитальном расщеплении электронных состояний, индуцированных потенциалом заряда изображения, была высказана в работе [207]. Основные выводы этой теории подтверждаются экспериментально [208; 209]. Представление о том, что кулоновское поле электронов порождает спин-орбитальное взаимодействие, использовалось в механизме генерации спинового тока в системе двух параллельных слоев [210].

Парное спин-орбитальное взаимодействие становится существенным, когда константа  $\alpha$  достаточно велика. Оценку характерной величины  $\alpha$ , существенно изменяющей взаимодействие, можно получить, сравнивая энергию спин-орбитального взаимодействия  $E_{\text{PSOI}} \sim \alpha k \frac{e}{r^2}$  и кулоновский потенциал взаимодействия  $V \sim \frac{e^2}{r}$ . Спин-орбитальная компонента преобладает при  $\alpha k > er$ , или, оценивая характерный волновой вектор  $k$  как  $k \sim 1/r$ , при  $\alpha > er^2$ .

Минимальное достижимое значение  $r$  в этой оценке ограничено характерным масштабом  $d$  модели. Этот масштаб может задаваться геометрией системы, например, толщиной слоя, который рассматривается как двумерная система, либо физическими

факторами, такими как шредингеровское дрожание электрона (*Zitterbewegung*) [211], которое отражает наличие второй зоны в энергетическом спектре. В любом случае, масштаб  $d$  по меньшей мере порядка  $10 \text{ \AA}$ , так что минимальное значение  $\alpha$  можно оценить на уровне  $100 \text{ e\AA}^2$ .

Например, в случае GaAs, где  $\alpha \approx 1 \text{ e\AA}^2$ , это условие заведомо не выполняется. Однако подобные значения  $\alpha$  достижимы в таких современных материалах, как слои  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [17], где  $\alpha \approx 10^3 \text{ e\AA}^2$ , полярный полупроводник  $\text{BiTeI}$  [18], монослои  $\text{BiSb}$  [19], дихалькогениды переходных металлов [20], слои графена с адсорбированными атомами тяжелых металлов [21; 22], перовскиты [23] и оксиды [24].

### 3.3 Парное спин-орбитальное взаимодействие в низкоразмерных системах

Форма гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия в конкретной низкоразмерной структуре определяется конфигурацией кулоновских полей в ней. В одномерном квантовом проводе единственным источником парного спин-орбитального взаимодействия служит кулоновское поле электрон-электронного взаимодействия, направленное перпендикулярно проводу, которое возникает, если система не является симметричной в радиальном направлении [168–171]. Такая асимметрия может быть создана, например, расположенным вблизи провода металлическим затвором. В этом случае источником парного спин-орбитального взаимодействия оказывается поле зарядов изображения, индуцированных электронами на затворе. В двумерных системах, симметричных по отношению к инверсии нормальной координаты, парное спин-орбитальное взаимодействие порождается кулоновскими полями в плоскости системы [172; 173], в то время как в двумерных системах с затвором парное спин-орбитальное взаимодействие создается за счет совместного действия латерального и нормального полей, суммарный эффект которых приводит к довольно неожиданным результатам [174]. Ниже мы детально изучим

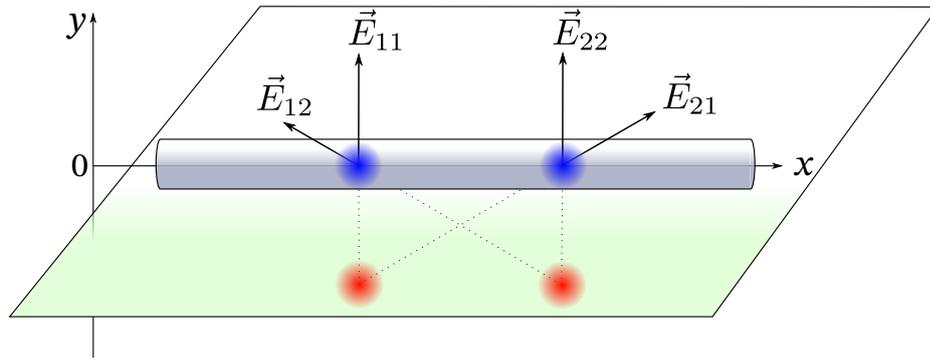


Рисунок 3.1 — Квантовый провод с двумя электронами, индуцирующими заряды изображения на затворе. Электрические поля, действующие на каждый электрон со стороны зарядов изображения, показаны стрелками, тогда как поля, созданные соседними электронами непосредственно, никак не обозначены, поскольку в одномерных системах они не дают вклад в парное спин-орбитальное взаимодействие.

конфигурацию электрических полей в этих системах и для каждой из них выведем гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия.

### 3.3.1 Квантовые провода

Рассмотрим квантовый провод, расположенный параллельно проводящему затвору, как показано на Рисунке 3.1. Кулоновское отталкивание между двумя электронами, заэкранированное зарядами изображения, описывается потенциалом электрон-электронного взаимодействия

$$U(r) = \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{r^2 + d^2}} - \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{r^2 + a^2}}, \quad (3.17)$$

где  $r = x_1 - x_2$  есть относительная координата электронов,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость объемного материала,  $d$  — диаметр квантового провода,  $a/2$  — расстояние между проводом и затвором.

Электрическое поле, действующее на каждый электрон, создается соседним электроном и зарядами изображения, индуцированными на затворе. Особенность одномерного случая состоит в том, что электрическое поле соседнего электрона, будучи параллельным импульсу электрона, не дает вклада в спин-орбитальное

взаимодействие. Единственным источником парного спин-орбитального взаимодействия в уравнении (3.12) служит поле заряда изображения от соседнего электрона, у которого есть компонента, нормальная к проводу:

$$E_{ij}^y \equiv E_n(r) = \frac{ea}{\epsilon(r^2 + a^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.18)$$

Гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия (3.12), записанный в представлении вторичного квантования, имеет вид [168]

$$H_{\text{PSOI}} = \frac{\alpha}{2\hbar} \sum_{s_1 s_2} \int \psi_{s_1}^+(x_1) \psi_{s_2}^+(x_2) [\hat{S}_{12}, E_n(x_1 - x_2)]_+ \psi_{s_2}(x_2) \psi_{s_1}(x_1) dx_1 dx_2, \quad (3.19)$$

где  $\psi_s(x)$  есть электронный полевой оператор,  $\hat{S}_{12} = (\hat{p}_{x_1} s_1 + \hat{p}_{x_2} s_2)/2$ , а антикоммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$  гарантирует эрмитовость гамильтониана [212]. Для определенности, будем в дальнейшем полагать  $\alpha > 0$ .

Нормальное поле  $F = F_0 + F_g$ , созданное собственным изображением электрона  $F_0 = E_n(0)$  и плотностью заряда  $n_g$  на затворе,  $F_g = 4\pi n_g/\epsilon$ , соответственно, дает вклад в одночастичное рашбовское спин-орбитальное взаимодействие,

$$H_{\text{RSOI}} = \frac{\alpha}{\hbar} \sum_s \int \psi_s^+(x) F \hat{p}_x s \psi_s(x) dx. \quad (3.20)$$

При рассмотрении задачи двух тел удобно будет воспользоваться записью гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия в двухчастичном базисе  $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ . Для этого в гамильтониане (3.12) необходимо перейти к кронекеровой сумме слагаемых [213]. В результате получим [171]

$$H_{\text{PSOI}} = \frac{\alpha}{\hbar} \text{diag} \{E_n(r)P, [E_n(r), p]_+, -[E_n(r), p]_+, -E_n(r)P\}, \quad (3.21)$$

где  $p = -i\hbar\partial_r$ , координата центра масс равна  $R = (x_1 + x_2)/2$ , а соответствующий импульс равен  $P = -i\hbar\partial_R$ . Одночастичное взаимодействие Рашбы легко учесть, просто добавив поле  $F$  к нормальному полю  $E_n(r)$  в уравнении (3.21).

Также для дальнейшего окажется удобно ввести безразмерную константу спин-орбитального взаимодействия  $\tilde{\alpha} = \alpha/ea_B^2$ , где боровский радиус есть  $a_B = \epsilon\hbar^2/me^2$ , а также ридберговскую постоянную в материале  $Ry = \hbar^2/2ma_B^2$ . Ниже в оценках, если не оговорено противного, мы будем полагать  $\tilde{\alpha} \approx 1$  и  $a_B \approx 100 \text{ \AA}$ . Эти значения близки к достижимым в современных материалах типа  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [17; 34].

### 3.3.2 Двумерные системы

Потенциал электрон-электронного взаимодействия в двумерной системе, сформированной в диэлектрически однородной среде с проницаемостью  $\epsilon$ , равен

$$U(r) = \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (3.22)$$

а поле в плоскости двумерной системы, порождающее парное спин-орбитальное взаимодействие, равно

$$\mathbf{E}_\tau(\mathbf{r}) = \frac{1}{e} \nabla_r U = -\frac{e}{\epsilon r^2} \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (3.23)$$

Нормальное же поле  $E_n$  в симметричной двумерной системе равно нулю.

При поиске наиболее перспективных двумерных систем для изучения эффектов парного спин-орбитального взаимодействия необходимо иметь в виду, что в материалах с сильным эффектом Рашбы диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  обыкновенно довольно велика, в интервале 10 ... 100 [34], что сильно подавляет эффекты электрон-электронного и, тем самым, парного спин-орбитального взаимодействия. В своей классической работе [214] Леонид Келдыш выдвинул пионерскую идею о том, что нежелательного диэлектрического экранирования электрон-электронного взаимодействия в объеме материала можно избежать, если рассматривать тонкий двумерный слой этого материала, поместив его в среду из слабого диэлектрика. В такой геометрии изменяется не только величина, но и пространственная зависимость потенциала электрон-электронного взаимодействия, который принято теперь называть потенциалом Рытовой-Келдыша [215] в знак признания более раннего вклада Натальи Рытовой [216]. Спустя десятилетия после создания этих работ, свободно подвешенные двумерные слои оказались в центре экспериментальной активности [217–219].

Эту идею можно развить дальше, рассмотрев структуру, в которой тонкий двумерный слой отделен подложкой из слабого диэлектрика от заряженного металлического затвора, как показано на Рисунке 3.2. Двумерные слои с металлическим затвором привлекают сейчас большое внимание, поскольку величину рашбовского

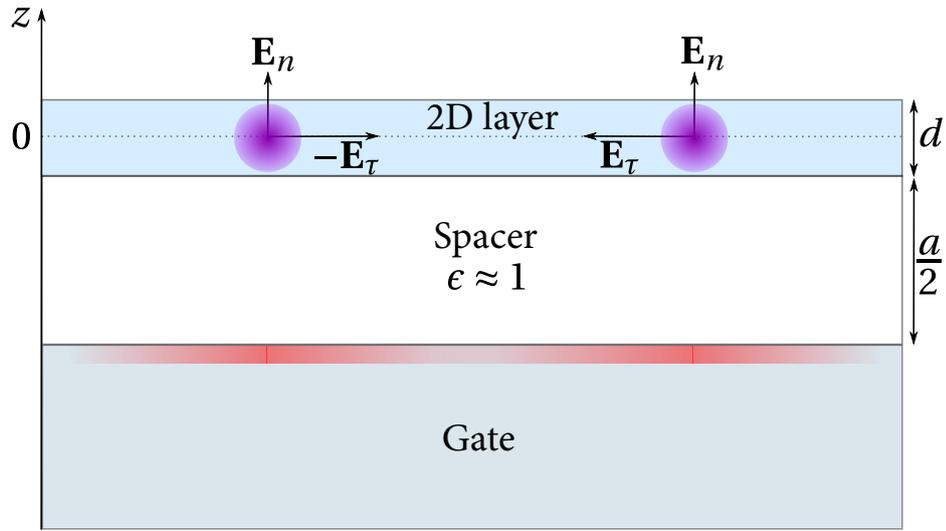


Рисунок 3.2 — Двумерный слой, отделенный от металлического затвора подложкой из слабого диэлектрика. Электрическое поле, действующее на каждый электрон со стороны соседнего электрона, поляризационных зарядов, и полного заряда затвора, имеет как нормальную компоненту  $E_n$ , так и компоненту в плоскости системы  $E_\tau$ , причем обе они вносят вклад в парное спин-орбитальное взаимодействие.

взаимодействия в них можно изменять в широких пределах просто путем приложения напряжения к затвору [19; 220]. Важно, что на малых расстояниях между электронами, где как раз и формируются связанные электронные пары, затвор не экранирует потенциал электрон-электронного взаимодействия и кулоновское поле в плоскости, которое дает основной вклад в парное спин-орбитальное взаимодействие. Нормальное к системе поле зарядов изображения на затворе дает дополнительный вклад в парное спин-орбитальное взаимодействие, а поле заряженного затвора позволяет регулировать величину рашбовского расщепления.

Потенциал электрон-электронного взаимодействия в двумерном слое с затвором выведен в Приложении Б и равен [174]

$$U(r) = 2e^2 \int_0^\infty \frac{J_0(kr) dk}{1 + 4\pi\chi k + \coth(ka/2)}, \quad (3.24)$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  есть относительный радиус-вектор электронов,  $J_0$  — функция Бесселя первого рода [221],  $\chi$  — двумерная зарядовая восприимчивость слоя [222; 223],  $a/2$  — расстояние до затвора.

При  $a \rightarrow \infty$  этот результат, как и следует, переходит в потенциал Рытовой-Келдыша для свободно подвешенного слоя:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{\pi e^2}{4\pi\chi} \left[ H_0\left(\frac{r}{2\pi\chi}\right) - Y_0\left(\frac{r}{2\pi\chi}\right) \right], \quad (3.25)$$

где  $H_0$  — функция Струве,  $Y_0$  — функция Бесселя второго рода [221]. Двумерная восприимчивость  $\chi$ , которая имеет размерность длины, задает масштаб перехода между дальнедействующим  $\sim 1/r$  кулоновским хвостом потенциала и его коротко-масштабной логарифмической  $\sim \log r$  расходимостью.

Поле в плоскости определяется по потенциалу взаимодействия как  $\mathbf{E}_\tau(\mathbf{r}) = \frac{1}{e} \nabla_r U$ , а нормальная к системе компонента поля равна

$$E_n(r) = e \int_0^\infty \frac{J_0(kr)k dk}{e^{ka} + 2\pi\chi k(e^{ka} - 1)}. \quad (3.26)$$

При  $a \rightarrow \infty$  нормальное поле  $E_n(r) \rightarrow 0$ , как это и должно быть для симметричной системы.

Двумерную восприимчивость можно оценить как  $\chi \approx \epsilon d/4\pi$ , где  $\epsilon$  есть параллельная компонента диэлектрического тензора объемного материала, а  $d$  — толщина слоя [224]. Особый интерес для дальнейшего будет представлять случай  $a \lesssim 4\pi\chi$ , когда вклад индуцированных на затворе зарядов изображения не мал. При  $r \ll a$ , асимптотика полей такова:

$$E_n(r) \sim \frac{e}{2\pi\chi} \frac{1}{\sqrt{r^2 + a^2}} \quad (3.27)$$

и

$$\mathbf{E}_\tau(\mathbf{r}) \sim -\frac{e}{2\pi\chi r} \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (3.28)$$

Коль скоро величина поля в плоскости не обрезается на расстоянии до затвора, его вклад в парное спин-орбитальное взаимодействие, вообще говоря, больше, чем вклад нормального поля.

Гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия (3.12) в двухчастичном базисе принимает вид [174; 175]

$$H_{\text{PSOI}} = \frac{\alpha}{2\hbar} \begin{pmatrix} \frac{4E_\tau(r)}{r}(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z & -\xi_+ + \Xi_+ & \xi_+ + \Xi_+ & 0 \\ -\xi_- + \Xi_- & \frac{2E_\tau(r)}{r}(\mathbf{r} \times \mathbf{P})_z & 0 & \xi_+ + \Xi_+ \\ \xi_- + \Xi_- & 0 & -\frac{2E_\tau(r)}{r}(\mathbf{r} \times \mathbf{P})_z & -\xi_+ + \Xi_+ \\ 0 & \xi_- + \Xi_- & -\xi_- + \Xi_- & -\frac{4E_\tau(r)}{r}(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Здесь введены радиус-вектор центра масс  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ , импульсы относительного движения  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$  и центра масс  $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}$ . Кроме того, обозначено  $\xi_{\pm} = [F(r), \gamma_{\pm}]_{\pm}$ ,  $\Xi_{\pm} = F(r)\Gamma_{\pm}$ , где  $\Gamma_{\pm} = P_y \pm iP_x$  и

$$\gamma_{\pm} = p_y \pm ip_x = \hbar e^{\mp i\phi} \left( \pm \partial_r - \frac{i}{r} \partial_\phi \right), \quad (3.30)$$

а нормальное поле  $F(r)$  просто равно  $E_n(r)$ .

Одночастичное рашбовское взаимодействие можно включить в уравнение (3.29), прибавив поле

$$F_g = 4\pi n_g + E_n(0), \quad (3.31)$$

порожденное плотностью заряда на затворе  $n_g$  и собственным изображением электрона, к нормальному полю  $E_n(r)$ , так что полное нормальное поле будет равно  $F(r) = E_n(r) + F_g$ . В дальнейшем будет удобно сдвинуть энергию на величину  $eF_g a/2$ . Это устраняет тривиальный эффект потенциала затвора и позволяет учитывать только эффект нормального электрического поля.

### 3.4 Спин-орбитальный механизм электронного спаривания

Один из главных эффектов парного спин-орбитального взаимодействия — это образование связанных электронных пар. Спаривание электронов обычно связывается с притягивающим силовым взаимодействием между ними при посредничестве решетки или многочастичных возмущений электронной системы [5; 6]. Поиск

механизмов спаривания с большой энергией связи открывает широкие перспективы для изучения новых многочастичных эффектов в современных низкоразмерных структурах и материалах, не говоря уже о высокотемпературной сверхпроводимости. Парное спин-орбитальное взаимодействие дает пример чисто электронного механизма спаривания. Его наиболее интересный аспект состоит в том, что к спариванию приводит просто движение электронов в определенных спиновых конфигурациях, при условии, что величина спин-орбитального взаимодействия достаточно высока.

Интерес к связанным электронным парам, с одной стороны, связан с тем, что, в отличие от многоэлектронной задачи, задача двух тел допускает точное решение и, тем самым, способна дать ответ на вопрос, к каким эффектам приводит парное спин-орбитальное взаимодействие при любом значении его амплитуды. С другой стороны, связанные состояния двух и более частиц и сами по себе играют очень важную роль в физике низкоразмерных систем. Помимо куперовских пар, достаточно назвать экситоны, трионы, экситонные комплексы, которые широко исследуются на протяжении многих лет [5; 225].

В этом разделе диссертации обсуждаются условия, при которых формируются связанные электронные пары в квантовых проводках и двумерных электронных системах, получены их спектр, электронная структура и топология распределения спиновой плотности, а также энергия связи, которая оценена на уровне нескольких мэВ.

### 3.4.1 Связанные электронные пары в квантовых проводках

Двухэлектронная волновая функция  $\Psi(x_1, x_2)$  представляет собой спинор Паули четвертого ранга. Вследствие трансляционной инвариантности мы можем написать, что  $\Psi(x_1, x_2) = e^{iKR}\psi(r)$ , где  $\hbar K$  есть полный импульс пары электронов. Спинор  $\psi(r) = (\psi_{\uparrow\uparrow}, \psi_{\uparrow\downarrow}, \psi_{\downarrow\uparrow}, \psi_{\downarrow\downarrow})^T$  описывает уже только относительное движение электронов,

хотя его компоненты в принципе могут зависеть от  $K$ , если от  $K$  будет зависеть связывающий потенциал.

Уравнение движения на  $\psi(r)$  получается из полного гамильтониана системы  $H = H_{\text{PSOI}} + U + T$ , который включает в себя гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия (3.21), кулоновское отталкивание (3.17), а также кинетическую энергию  $T$ . Для простоты, в дальнейшем мы ограничимся минимальной моделью с квадратичной дисперсией,

$$T = \sum_{i=1}^2 \frac{p_{x_i}^2}{2m}. \quad (3.32)$$

Уравнение Шредингера для спинора  $\Psi$  приводит к следующим уравнениям для спинорных компонент  $\psi_{\uparrow\downarrow}$  и  $\psi_{\uparrow\uparrow}$  [171]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{m} \partial_r^2 - 2i\alpha(F + E_n(r))\partial_r - i\alpha E_n'(r) + U(r) \right] \psi_{\uparrow\downarrow} = \left( \varepsilon_{\uparrow\downarrow} - \frac{\hbar^2 K^2}{4m} \right) \psi_{\uparrow\downarrow} \quad (3.33)$$

и

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{m} \partial_r^2 + \alpha K E_n(r) + U(r) \right] \psi_{\uparrow\uparrow} = \left( \varepsilon_{\uparrow\uparrow} - \frac{\hbar^2 K^2}{4m} - \alpha K F \right) \psi_{\uparrow\uparrow}. \quad (3.34)$$

Уравнения для двух оставшихся спинорных компонент  $\psi_{\downarrow\uparrow}$  и  $\psi_{\downarrow\downarrow}$  получаются из уравнений (3.33) и (3.34), соответственно, изменением знака перед  $\alpha$ . Уравнения на спинорные компоненты оказались расцеплены, поскольку полный гамильтониан системы диагонален в выбранном двухчастичном базисе. Однако, поскольку полная волновая функция  $\psi(r)$  обязана быть антисимметричной по перестановке частиц, обе компоненты  $\psi_{\uparrow\downarrow}$  и  $\psi_{\downarrow\uparrow}$  оказываются замешанными в полном решении системы. Решения уравнений (3.33) и (3.34), принадлежащие дискретному спектру, описывают связанные электронные пары принципиально разной природы.

## Релятивные связанные состояния

Уравнение (3.33) описывает релятивные связанные состояния, которые возникают благодаря связывающему потенциалу, сформированному относительным движением электронов с противоположными спинами. При этом движение центра

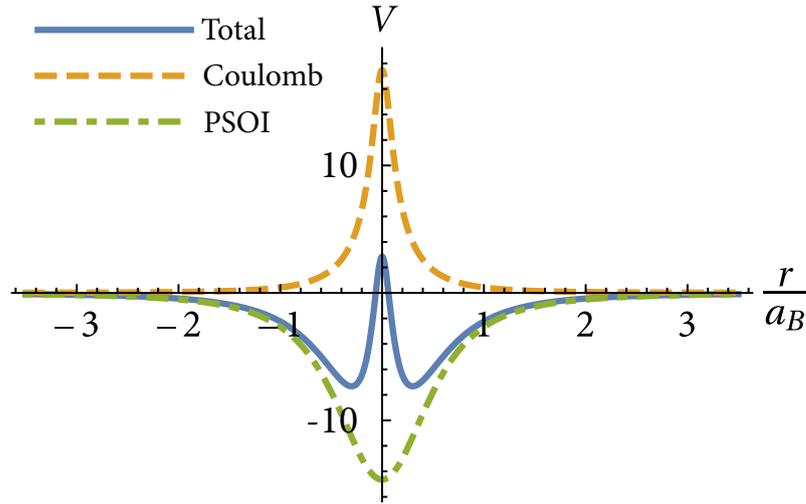


Рисунок 3.3 — Связывающий потенциал для относительного движения электронов  $V(r)$  (в ридбергах) и отдельно вклады в него со стороны кулоновского отталкивания (пунктирная линия) и парного спин-орбитального взаимодействия (штрих-пунктирная линия). Параметры системы таковы:  $a = 0.8a_B$  и  $d = 0.1a_B$ .

масс полностью отцепляется от относительного движения и не влияет на связывающий потенциал, а значит, и на распределение электронной и спиновой плотности.

Явный вид связывающего потенциала легко установить, совершив калибровочное преобразование волновой функции  $\psi_{\uparrow\downarrow}(r) = u(r)e^{-i\phi(r)}$ , где

$$\phi(r) = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \int_0^r (F + E_n(\eta)) d\eta. \quad (3.35)$$

Преобразованная функция подчиняется одночастичному уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{m}u'' + V(r)u = \varepsilon u, \quad (3.36)$$

где  $\varepsilon = \varepsilon_{\uparrow\downarrow} - \frac{\hbar^2 K^2}{4m} + \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}F^2$  есть энергия связи. Потенциальный профиль

$$V(r) = U(r) - \frac{m\alpha^2}{\hbar^2} [E_n^2(r) + 2FE_n(r)] \quad (3.37)$$

показан на Рисунке 3.3, где вместе с ним отдельно показаны вклады кулоновского отталкивания и парного спин-орбитального взаимодействия.

Видно, что кулоновское отталкивание подавляется парным спин-орбитальным взаимодействием. Более того, парное спин-орбитальное взаимодействие достаточно большой величины приводит к глобально притягивающему потенциалу  $V(r)$ , то есть становится  $\int V(r) dr < 0$ . В одномерном случае этого достаточно для возникновения связанного состояния в спектре [226]. Таким образом, достаточное условия

возникновения релятивной связанной электронной пары имеет вид [171]

$$\tilde{\alpha} > \left( \frac{\frac{a^3}{a_B^3} \log \frac{a}{d}}{\frac{2F}{F_0} + \frac{3\pi}{16}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.38)$$

Выполнения этого условия всегда можно добиться, увеличивая поле  $F = F_g + F_0$ , то есть прикладывая напряжение к затвору. В случае нулевого приложенного напряжения,  $F = F_0 = e/\epsilon a^2$ , так что условие (3.38) принимает вид

$$\tilde{\alpha}^2 > \frac{2}{4 + \frac{3\pi}{8}} \left( \frac{a}{a_B} \right)^3 \log \frac{a}{d}. \quad (3.39)$$

Численная оценка этого условия для системы на основе  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , для которого  $\alpha \approx 1300 \text{ e}\text{\AA}^2$  [34],  $a_B \approx 52 \text{ \AA}$  и, следовательно,  $\tilde{\alpha} \approx 0.47$ , приводит к требованию  $a \leq 40 \text{ \AA}$ , которое представляется вполне достижимым в современных наноструктурах.

Энергию связи мы оценили как [171; 227]

$$|\varepsilon| = \frac{m}{4\hbar^2} \left( \int_{-\infty}^{\infty} V(r) dr \right)^2 = 2Ry \left[ \frac{2\tilde{\alpha}^2}{(a/a_B)^3} \left( \frac{F}{F_0} + \frac{3\pi}{32} \right) - \log \frac{a}{d} \right]^2. \quad (3.40)$$

Зависимость энергии связи от поля затвора показана на Рисунке 3.4. Видно, что приложение к затвору напряжения подходящей полярности способствует электронному спариванию, поскольку при этом растет энергия связи. Для разумных значений электрического поля  $F \approx 3 \cdot 10^5 \text{ В/см}$ , при расстоянии  $a \approx 50 \text{ \AA}$  и диаметре провода  $d \approx 10 \text{ \AA}$ , мы получаем оценку  $|\varepsilon|$  порядка 10 мэВ.

Поскольку потенциальный профиль  $V(r)$  симметричен по отношению к  $r = 0$ , основному состоянию отвечает четное решение  $u(r) = u(-r)$  уравнения (3.36). Иными словами, функция  $u(r)$  инвариантна относительно перестановки частиц ( $r \rightarrow -r$ ). Вместе с тем, уравнение (3.35) показывает, что  $\phi(r)$  является нечетной функцией своего аргумента. Поэтому антисимметричная волновая функция релятивной связанной электронной пары дается формулой [171]

$$\Psi(r, R) = (0, e^{-i\phi(r)}, -e^{i\phi(r)}, 0)^T u(r) e^{iKR}. \quad (3.41)$$

Это состояние имеет смешанную синглет-триплетную структуру, то есть не обладает определенным спином.

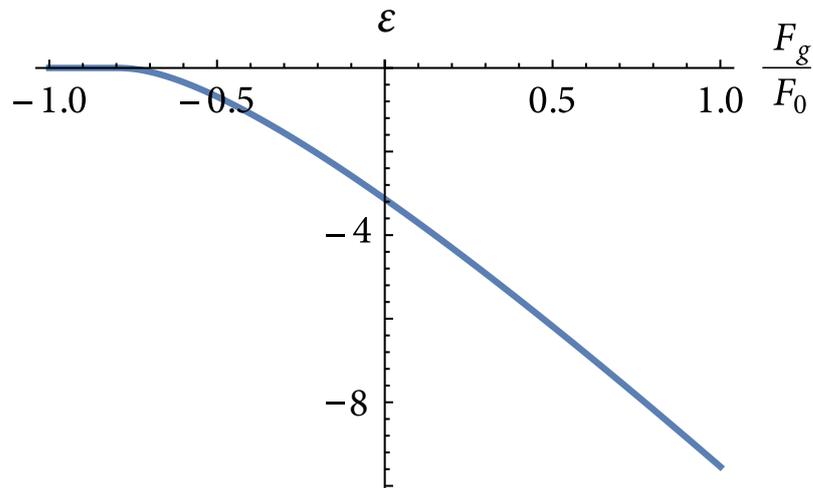


Рисунок 3.4 — Зависимость энергии связи (в ридбергах) от поля заряженного затвора, определенная из численного решения уравнения (3.36). Те же параметры, что и на рисунке 3.3.

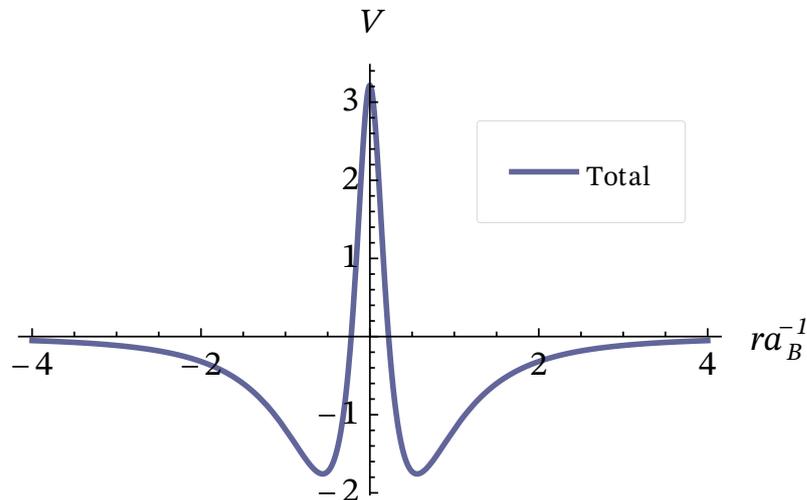


Рисунок 3.5 — Связывающий потенциал для конвективных квантовых состояний  $V(r)$  (в ридбергах) для  $Ka_B = 5$ . Остальные параметры системы те же, что и на рисунке 3.3.

### Конвективные связанные состояния

Решения уравнения (3.34) мы назвали конвективными состояниями. Они обладают другими и совсем необычными свойствами. В них движение центра масс, напротив, играет принципиальную роль, так как притяжение электронов возникает именно благодаря движению центра масс, то есть движению электронной пары как целого. В одномерных системах оба типа связанных состояний всегда лежат в щели под дном зоны проводимости.

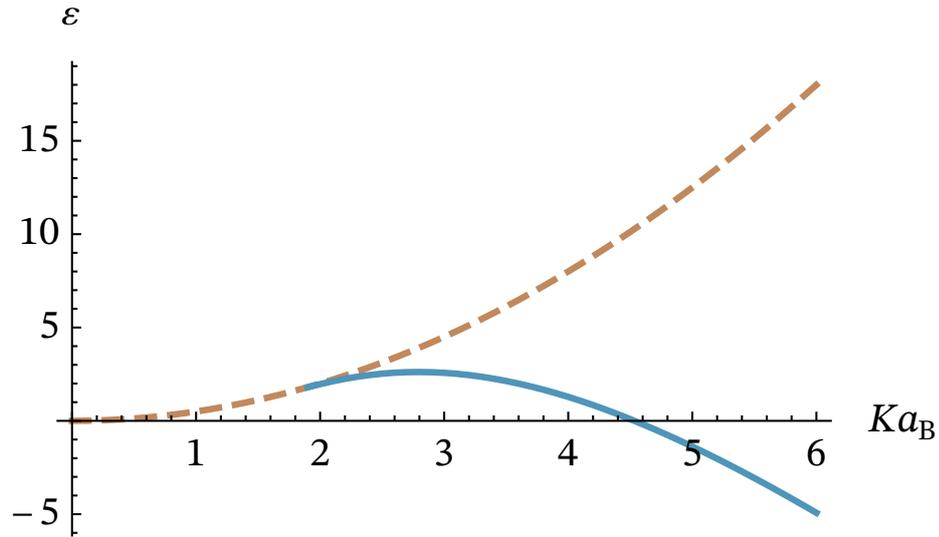


Рисунок 3.6 — Уровень энергии (в ридбергах) первого конвективного состояния (сплошная линия) и кинетическая энергия центра масс (пунктир) в зависимости от  $Ka_B$ . Те же параметры, что и на рисунке 3.3.

Пространственная зависимость связывающего потенциала  $V(r) = \alpha KE_n(r) + U(r)$  показана на Рисунке 3.5. Вклад в связывающий потенциал со стороны парного спин-орбитального взаимодействия, равный  $V_{\text{PSOI}}(r) = \alpha KE_n(r)$ , пропорционален импульсу центра масс  $K$ , знак и величина которого определяет наличие связанных состояний, а также их энергию связи. Большие отрицательные  $K$  приводят к возникновению состояний  $\psi_{\uparrow\uparrow}$ , а большие положительные  $K$  — состояний  $\psi_{\downarrow\downarrow}$  [171]. Таким образом, в одномерных квантовых проводах конвективное состояние формируется парой электронов с параллельными спинами, направление которого привязано к направлению импульса центра масс. Отметим, что, в отличие от релятивных связанных состояний, поле затвора  $F$  не входит в связывающий потенциал и, таким образом, не влияет на энергию связи конвективных состояний, однако ей, тем не менее, можно управлять, меняя величину тока в проводе.

Рисунок 3.6 показывает энергию первого (наиболее глубокого) конвективного связанного состояния, а также кинетическую энергию центра масс пары, как функцию параметра  $Ka_B$ . Эта зависимость получена путем численного решения уравнения (3.34). Сплошная линия на Рисунке 3.6 представляет собой закон дисперсии конвективной связанной пары. Связанные состояния, как видно, возникают в спектре при соответствующих критических значениях  $K$ , а их энергия связи растет вместе с  $K$ .

Найдем критическое значение  $K$ , при котором в системе возникают конвективные связанные пары электронов. Заметим, что в силу антисимметрии по перестановке частиц,  $\psi_{\uparrow\uparrow}(r)$  должна быть нечетной функцией своего аргумента. Следовательно, уравнение Шредингера можно решать на полуоси:

$$\begin{cases} -\partial_r^2 \psi_{\uparrow\uparrow} + V(r)\psi_{\uparrow\uparrow} = 0, & r \in (0, \infty) \\ \psi_{\uparrow\uparrow}|_{r=0} = \psi_{\uparrow\uparrow}|_{r=+\infty} = 0. \end{cases} \quad (3.42)$$

Заменой  $\eta = \log r$ ,  $u(\eta) = \psi_{\uparrow\uparrow}(e^\eta)e^{-\frac{\eta}{2}}$  и  $W(\eta) = e^{2\eta}V(e^\eta)$  преобразуем уравнение (3.42) к виду

$$\begin{cases} -\partial_\eta^2 u + W(\eta)u = -\frac{1}{4}u, & \eta \in (-\infty, \infty) \\ u|_{\eta=\pm\infty} = 0. \end{cases} \quad (3.43)$$

Оценив энергию связи как  $|\varepsilon| = \frac{1}{4}[\int W(\eta) d\eta]^2$  [227], мы приходим к критическому условию

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(\eta) d\eta = -1. \quad (3.44)$$

Условие существования конвективных связанных пар, записанное для исходного потенциала, имеет вид

$$\int_0^{\infty} rV(r) dr \leq -1, \quad (3.45)$$

что вполне аналогично пределу Баргманна для числа связанных состояний в центральном потенциале в случае трех измерений. Окончательно, мы приходим к искомому условию на критическое значение импульса  $K$ :

$$\tilde{\alpha}K \geq (1 + a - d)a, \quad (3.46)$$

где все переменные обезразмерены на боровский радиус. Оценки для системы на базе  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  с параметрами  $a = 30 \text{ \AA}$  и  $d = 10 \text{ \AA}$  приводят к критическому значению импульса пары порядка  $K \approx 10^7 \text{ см}^{-1}$ .

Подводя итог этого раздела, мы показали, что в квантовых проводах за счет парного спин-орбитального взаимодействия электронов возникает их притяжение, которое приводит к спариванию частиц. При этом связанные электронные пары могут быть двух типов в соответствии с характером движения электронов.

В обоих случаях для возникновения связанных состояний расстояние между проводом и затвором должно быть достаточно малым. В релятивных связанных парах принципиальную роль играет относительное движение частиц, которое приводит к появлению эффективного связывающего потенциала для радиального относительного движения. Величина этого потенциала зависит не только от поля кулоновского взаимодействия электронов, но и от величины электрического поля заряженного затвора. Последнее обстоятельство позволяет управлять энергией связи, просто изменяя потенциал затвора. Спиновая структура этих состояний является смешанной синглет-триплетной. Конвективные связанные пары образуются вследствие движения центра масс электронов, благодаря которому возникает притяжение электронов с параллельными спинами. В этом случае эффективный притягивающий потенциал увеличивается с импульсом центра масс, а проекция спина этого триплетного состояния определяется направлением ее импульса. Для реалистичных параметров материала энергии связи находятся на уровне нескольких мэВ.

### 3.4.2 Связанные электронные пары в двумерных системах

Парное спин-орбитальное взаимодействие приводит к образованию связанных двухэлектронных состояний в двумерных системах [172—175], вполне аналогично одномерному случаю. Однако спиновая структура и спектр связанных состояний в двумерных слоях сильно отличаются от найденных в одномерных системах в силу различной конфигурации электрических полей, которые определяют парное спин-орбитальное взаимодействие, и большего числа степеней свободы в двумерной системе. Несмотря на эти отличия, связанные электронные пары все же можно расклассифицировать, исходя из природы движения, которое порождает спин-орбитальное взаимодействие, на релятивные и конвективные состояния. В этой и следующих частях мы изучим их свойства в двумерных системах с различным диэлектрическим экранированием, начиная с самого простого случая диэлектрически

однородной системы, и заканчивая тонким двумерным слоем с металлическим затвором.

Случай симметричной по отношению к инверсии нормали двумерной системы, сформированной в диэлектрически однородной среде, поучителен тем, что он допускает полное аналитическое исследование [172]. Итак, рассмотрим проблему двух взаимодействующих электронов с парным спин-орбитальным взаимодействием, которое порождается параллельными плоскости системы кулоновскими полями электронов. Мы покажем, что спин-зависимое притяжение электронов возникает в гамильтониане взаимодействия безо всякого участия зарядов изображения. Связанные электронные пары образуются, как только это притяжение преодолет кулоновский барьер между электронами. Это происходит для достаточно большой амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия. При этих условиях в системе возникают связанные состояния двух различных типов.

Релятивные состояния в симметричных двумерных системах представляют собой триплетные пары, образованные электронами, вращающимися вокруг общего центра масс, при этом направление их спина привязано к направлению орбитального углового момента. Энергия связи этих состояний не зависит от движения центра масс.

Конвективные состояния возникают вследствие движения электронной пары как целого. Они формируются электронами с противоположными спинами, а двухчастичное состояние имеет смешанную синглет-триплетную структуру. Эффективное притяжение между электронами растет вместе с импульсом центра масс, так что энергия связи и эффективная масса пары существенно зависят от импульса пары.

Волновая функция электронной пары в двухчастичном базисе представляется спинором Паули четвертого ранга, зависимость которого от радиус-вектора центра масс вновь диктуется трансляционной инвариантностью системы,  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\Psi_{\uparrow\uparrow}, \Psi_{\uparrow\downarrow}, \Psi_{\downarrow\uparrow}, \Psi_{\downarrow\downarrow})^T = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ , где  $\mathbf{K}$  есть квантовое число. Волновая функция относительного движения  $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{K})$  зависит от импульса центра масс лишь опосредованно, через зависимость от него связывающего потенциала.

Гамильтониан парного спин-орбитального взаимодействия описывается уравнением (3.29), в котором нормальную компоненту поля следует положить равной

нулю в силу симметрии рассматриваемой системы. Таким образом, гамильтониан оказывается диагональным, а уравнения движения на компоненты спинора, следовательно, расцепляются. Полный гамильтониан системы  $H = H_{\text{PSOI}} + U + T$ , как и в одномерном случае, включает в себя кулоновское отталкивание  $U$  и кинетическую энергию  $T$ .

Уравнения движения на компоненты спинора имеют вид

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + U(\mathbf{r}) + \frac{2\alpha E_{\tau}(\mathbf{r})}{\hbar r} (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z \right] \Psi_{\uparrow\uparrow} = \varepsilon_{\uparrow\uparrow} \Psi_{\uparrow\uparrow} \quad (3.47)$$

и

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + U(\mathbf{r}) + \frac{\alpha E_{\tau}(\mathbf{r})}{\hbar r} (\mathbf{r} \times \mathbf{P})_z \right] \Psi_{\uparrow\downarrow} = \varepsilon_{\uparrow\downarrow} \Psi_{\uparrow\downarrow}. \quad (3.48)$$

Уравнения для двух оставшихся компонент получаются из этих уравнений изменением знака перед  $\alpha$ . Полученную в результате их решения полную волновую функцию необходимо антисимметризовать по перестановкам частиц.

Совершенно понятно, что в уравнении (3.47) относительное движение электронов полностью разделяется с движением центра масс. Решения этого уравнения описывают релятивные состояния. Структура оператора спин-орбитального взаимодействия вполне аналогична таковой в атомах [227], но с существенной разницей в величине взаимодействия  $\alpha$  и в размерности системы.

Напротив, в уравнении (3.48) относительное движение вовсе не расцепляется с движением центра масс. Более того, именно движение центра масс и формирует здесь притяжение между электронами, которое приводит к образованию конвективных связанных состояний. Оба типа состояний детально изучены ниже.

## Релятивные связанные состояния

Уравнение движения на спинорную компоненту волновой функции относительного движения непосредственно следует из уравнения (3.47). С учетом явного вида потенциала (3.22) и поля (3.23), формирующего спин-орбитальное взаимодействие,

мы получаем

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{m}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}) + 2\alpha l_z \frac{e}{\epsilon r^3} \right] \psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}). \quad (3.49)$$

Коль скоро орбитальный угловой момент  $l_z = -i\partial_\phi$  в направлении  $z$ , нормальном к системе, коммутирует с гамильтонианом, решения уравнения (3.49) можно выбрать среди собственных функций  $l_z$ ,

$$\psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}} e^{il\phi}. \quad (3.50)$$

Орбитальное угловое квантовое число  $l$  должно быть нечетным целым, поскольку этого требует антисимметрия  $\Psi_{\uparrow\uparrow}$  по отношению к перестановке электронов, т.е. при  $\phi \rightarrow \phi + \pi$ . Четные значения  $l$  при этом исключаются, так что, например,  $s$ -состояния в этой задаче не существуют, в отличие от двумерного атома водорода [228]. Спин-орбитальное взаимодействие снимает кулоновское вырождение по  $l$ .

Перенормируем расстояние на боровский радиус, а энергию на ридберговскую константу в материале. Тогда уравнение для радиальной части волновой функции  $u(r)$  примет вид

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + V(r)u = \frac{\varepsilon}{2}u, \quad (3.51)$$

где связывающий потенциал равен

$$V(r) = \frac{l^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + \frac{1}{r} + \frac{2\alpha l}{r^3}. \quad (3.52)$$

Первое слагаемое в связывающем потенциале есть отталкивающий центробежный потенциал, второе описывает кулоновское отталкивание между электронами. Третий член описывает парное спин-орбитальное взаимодействие и может быть как отталкивающим, так и притягивающим, в зависимости от знака  $l$ . Отрицательные значения  $l$  приводят к возникновению релятивного связанного состояния  $\Psi_{\uparrow\uparrow}$ , а положительные  $l$  — к состоянию  $\Psi_{\downarrow\downarrow}$ . Таким образом, спиновая ориентация этого триплетного состояния привязана к направлению орбитального углового момента.

Сингулярность потенциала  $\sim r^{-3}$  на малых расстояниях необходимо регулировать, чтобы избежать коллапса волновой функции, также известного как падение на центр [227]. Естественный масштаб обрезания задается постоянной решетки или

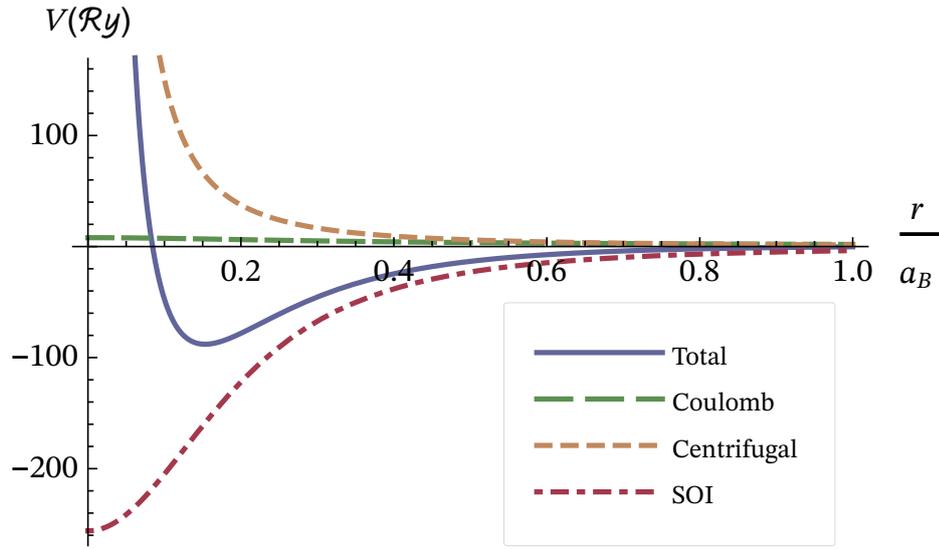


Рисунок 3.7 — Эффективный связывающий потенциал для релятивных состояний с  $l = 1$ . Отдельно показаны вклады центробежного потенциала, кулоновского отталкивания, и парного спин-орбитального взаимодействия.

толщиной слоя  $d$ . Также он может определяться физическими факторами, такими как, например, электронное дрожание [211]. В дальнейшем мы будем рассматривать  $d$  как комбинированный масштаб обрезания, учитывающий все эти факторы. Обрезать потенциал можно либо сгладив его координатную зависимость в области малых расстояний,

$$U(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{r^2 + d^2}}, \quad (3.53)$$

и, аналогично, координатную зависимость поля

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -e \frac{\mathbf{r}}{\epsilon(r^2 + d^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.54)$$

либо наложив нулевое граничное условие на волновую функцию при  $r = d$ , не изменяя потенциала при  $r > d$ . Обе процедуры приводят к близким результатам.

Обрезанный потенциал в перенормированных переменных принимает вид

$$V(r) = \frac{l^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + \frac{1}{\sqrt{r^2 + d^2}} + \frac{2\tilde{\alpha}l}{(r^2 + d^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.55)$$

Глубина потенциальной ямы максимальна при  $|l| = 1$ , так как при этом минимизируется центробежный барьер. Следовательно, основному состоянию отвечает

вырожденная триплетная пара вида

$$\Psi_{-}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = (e^{-i\phi}, 0, 0, 0)^{\top} \frac{u(r)}{\sqrt{r}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \quad (3.56)$$

и

$$\Psi_{+}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = (0, 0, 0, e^{i\phi})^{\top} \frac{u(r)}{\sqrt{r}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}. \quad (3.57)$$

Потенциальный профиль показан на Рисунке 3.7 для  $\tilde{\alpha} = 1$  и  $d = 0.25a_B$ . Кулоновское отталкивание пренебрежимо мало по сравнению с центробежным потенциалом и парным спин-орбитальным взаимодействием, пока  $d \ll a_B$ , а мы вправе ожидать соблюдения этого предела для чисто двумерной системы. В этих условиях связывающий потенциал зависит от одного комбинированного параметра,  $\alpha/da_B$ . Условие существования связанного состояния в этом потенциале, как было установлено, имеет вид  $\tilde{\alpha} > 2.3 \frac{d}{a_B}$ .

Увеличение параметра спин-орбиты  $\alpha$  или уменьшение толщины слоя  $d$  приводит к увеличению энергии связи  $|\varepsilon|$ . Для толщины слоя  $d = 0.25a_B$ , энергия связи релятивного состояния равна  $|\varepsilon| = 4.5 Ry$ , как показывает численное решение уравнений (3.51) и (3.55). Характерный размер электронной пары, определенный по положению пика в радиальной волновой функции, порядка  $d$ . Пространственная зависимость радиальной волновой функции и связывающего ее потенциала показана для этого случая на Рисунке 3.8.

## Конвективные связанные состояния

Конвективные связанные состояния возникают как решения уравнения (3.48). Направим ось  $y$  вдоль вектора  $\mathbf{K}$ , и введем полярный угол  $\phi$ , отсчитанный от оси  $x$ . Тогда уравнение на спинорную компоненту волновой функции относительного движения  $\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ , которая связана с полной волновой функцией соотношением  $\Psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ , примет вид

$$\left[ -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r} + \frac{\mathcal{A} \cos \phi}{r^2} \right] \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K}) = -\kappa^2 \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K}), \quad (3.58)$$

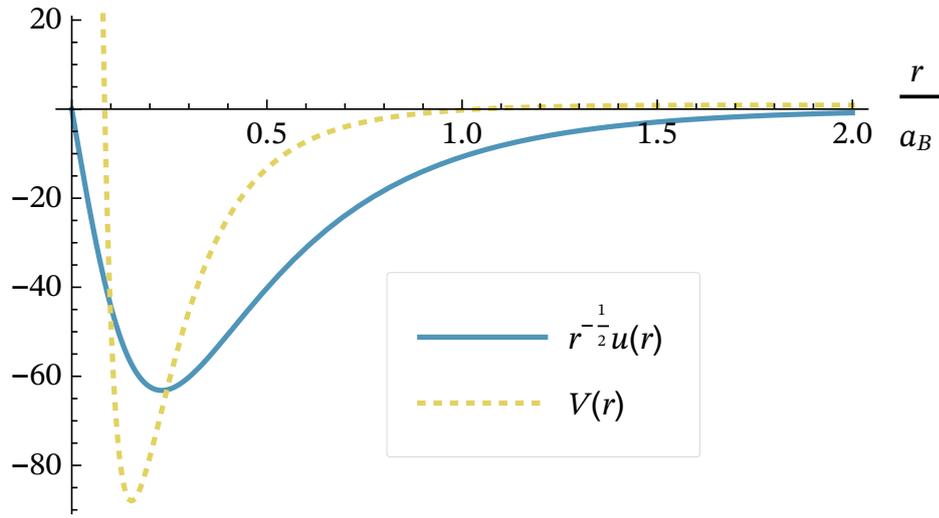


Рисунок 3.8 — Радиальная часть волновой функции релятивного связанного состояния (с точностью до нормировки) и эффективный связывающий потенциал для слоя толщиной  $d = 0.25a_B$ .

где  $\kappa^2 = |\varepsilon|/2$  и введена удобная безразмерная константа спин-орбитального взаимодействия

$$\mathcal{A} = \frac{\alpha K}{ea_B}. \quad (3.59)$$

Первые два члена в левой части уравнения (3.58) суть кинетическая энергия с центробежным потенциалом, а третий член описывает кулоновское отталкивание электронов. Четвертый член представляет для нас наибольший интерес, поскольку он описывает парное спин-орбитальное взаимодействие, порожденное движением электронной пары как целого.

Парное спин-орбитальное взаимодействие дает сильно анизотропный вклад в гамильтониан, который не коммутирует с орбитальным угловым моментом. Следовательно,  $l$  более не является квантовым числом. Это есть следствие нарушения вращательной симметрии за счет наличия выделенного направления вдоль  $\mathbf{K}$ . В результате конвективные состояния приобретают нетривиальную угловую зависимость, отличную от (3.50).

Решим уравнение (3.58) разделением переменных

$$\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K}) = f_{\uparrow\downarrow}(\phi)g(r), \quad (3.60)$$

где угловая часть определяется из уравнения

$$\frac{\partial^2 f_{\uparrow\downarrow}}{\partial \phi^2} + (-\lambda - \mathcal{A} \cos \phi) f_{\uparrow\downarrow} = 0, \quad (3.61)$$

а радиальная часть, совпадающая для  $\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$  и  $\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ , дается уравнением

$$\left[ -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} + \frac{1}{r} \right] g = -\kappa^2 g. \quad (3.62)$$

Параметр разделения  $\lambda$  задает амплитуду связывающего потенциала. Знак и величина  $\lambda$  отражают суммарный эффект притягивающего парного спин-орбитального взаимодействия и конкурирующего с ним отталкивающего центробежного потенциала. Положительные значения  $\lambda$  отвечают притягивающему потенциалу для радиального движения.

Начнем с анализа угловой зависимости решения.  $2\pi$ -периодические решения уравнения (3.61) возникают для бесконечного дискретного набора значений  $\lambda \in \{\lambda_m(\mathcal{A}) \mid m \in \mathbb{Z}\}$ , которые связаны с собственными значениями  $a_{2m}(q)$  и  $b_{2m}(q)$  функций Матьё  $ce_{2m}(z, q)$  и  $se_{2m}(z, q)$  [221]:

$$\lambda_m(\mathcal{A}) = \begin{cases} -\frac{1}{4} a_{2m}(2\mathcal{A}), & m = 0, 1, 2, \dots, \\ -\frac{1}{4} b_{2|m|}(2\mathcal{A}), & m = -1, -2, \dots \end{cases} \quad (3.63)$$

Целое число  $m$  есть угловое квантовое число, которое для конвективных состояний заменяет орбитальное угловое квантовое число  $l$ . Угловые волновые функции конвективных состояний равны

$$f_{\uparrow\downarrow}^{(m)}(\phi) = \begin{cases} ce_{2m} \left( \frac{\phi}{2}, 2\mathcal{A} \right), & m = 0, 1, 2, \dots, \\ se_{2|m|} \left( \frac{\phi}{2}, 2\mathcal{A} \right), & m = -1, -2, \dots \end{cases} \quad (3.64)$$

Рисунок 3.9 показывает зависимость амплитуды связывающего потенциала от  $\mathcal{A}$  для различных квантовых состояний. Для заданного  $m$ ,  $\lambda_m(\mathcal{A})$  больше нуля для достаточно большого  $\mathcal{A}$ , что означает, что парное спин-орбитальное взаимодействие достаточно большой амплитуды преодолевает центробежный барьер и создает притягивающий потенциал для радиального движения.

Заметим, что  $\lambda_0 > 0$  для любого положительного  $\mathcal{A}$ . Однако, из-за конкурирующего кулоновского отталкивания, связанные состояния возникают в спектре лишь

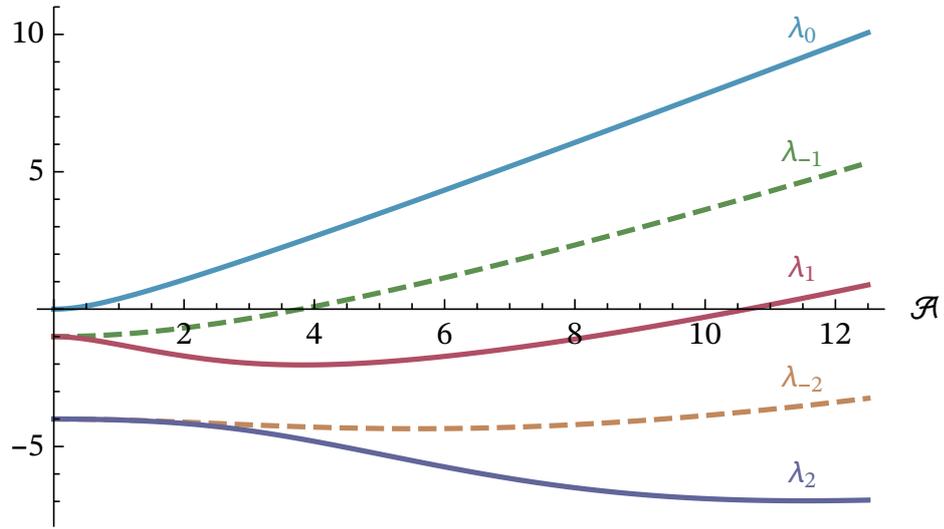


Рисунок 3.9 — Зависимость  $\lambda_m(\mathcal{A})$  от  $\mathcal{A}$  для нескольких значений  $m$ .

для  $\mathcal{A}$ , больших некоторого критического значения, которое вычислено ниже. Тем не менее, для фиксированного  $\mathcal{A}$  потенциальная яма с  $m = 0$  глубже, чем при  $m \neq 0$ . Таким образом, угловая часть волновой функции основного состояния  $\psi_{\uparrow\downarrow}$  равна

$$f_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(\phi) = ce_0 \left( \frac{\phi}{2}, 2\mathcal{A} \right), \quad (3.65)$$

а соответствующая амплитуда связывающего потенциала равна

$$\lambda_0(\mathcal{A}) = -\frac{1}{4}a_0(2\mathcal{A}). \quad (3.66)$$

Рисунок 3.10 показывает, что по мере роста спин-орбитального взаимодействия,  $f_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(\phi)$  изменяется от константы до пика вблизи  $\phi = \pi$ . Угловая часть  $\psi_{\uparrow\downarrow}$  равна

$$f_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(\phi) = ce_0 \left( \frac{\phi + \pi}{2}, 2\mathcal{A} \right), \quad (3.67)$$

а ее пик находится в окрестности  $\phi = 0$ .

Заметим, что  $f_{\uparrow\downarrow}(\phi + \pi) = f_{\downarrow\uparrow}(\phi)$  и  $f_{\downarrow\uparrow}(\phi + \pi) = f_{\uparrow\downarrow}(\phi)$ . Следовательно, полная антисимметричная по перестановке электронов волновая функция конвективного состояния равна

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = (0, f_{\uparrow\downarrow}(\phi), -f_{\downarrow\uparrow}(\phi), 0)^T g(r) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}. \quad (3.68)$$

Переходя к анализу радиальной зависимости волновой функции конвективных состояний, заметим, что она формируется притягивающим потенциалом  $-\lambda/r^2$ . Здесь мы снова сталкиваемся с фундаментальной проблемой, внутренне присущей однозонной модели спин-орбитального взаимодействия. Остановимся на ней подробнее.

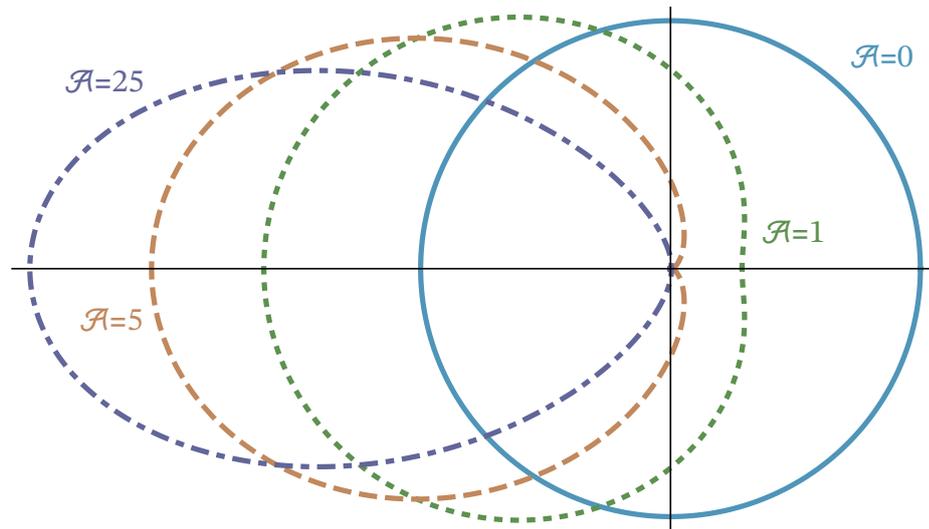


Рисунок 3.10 — Полярная диаграмма  $(f_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(\phi), \phi)$  для нескольких значений  $\mathcal{A}$ .

Дело в том, что притягивающий потенциал  $-1/r^2$  относится к классу переходных сингулярных потенциалов [229], которые изучались на протяжении десятилетий благодаря широкой распространенности в квантовой физике. Конкретно, потенциал  $-1/r^2$  встречается в задаче трех тел в ядерной физике [230], в контексте точечно-дипольного взаимодействия в молекулярной физике [231], и даже при изучении притяжения атомов к заряженному проводу [232]. В то же самое время, он приводит к патологическим свойствам решений уравнения Шредингера. Так, дискретный ортогональный набор собственных функций со своими собственными значениями не определяется условием квадратичной интегрируемости решений, что приводит к континууму связанных состояний с произвольной отрицательной энергией  $\varepsilon < 0$ . В литературе предпринимались попытки исправить ситуацию, потребовав дополнительно, чтобы собственные функции были взаимно ортогональны. К сожалению, эти попытки потерпели неудачу, поскольку спектр связанных состояний остается при этом неограниченным снизу, что означает, что в системе отсутствует основное состояние [233]. Этот классический пример проблемы коллапса волновой функции [234], который можно интерпретировать как падение на центр [227], недавно вновь привлек значительное внимание в связи с графеном [235; 236]. С математической точки зрения, корень проблемы в том, что гамильтониан с потенциалом  $-1/r^2$  не самосопряжен, хотя и симметричен [237].

Наиболее последовательный подход к возникающей проблеме состоит в выходе за рамки однозонного приближения и в учете спин-орбитального взаимодействия без использования низкоэнергетического разложения. Такая задача применительно к заряженному центру решена ниже, в разделе 3.4.5.

В рамках же однозонной модели для решения указанной проблемы было развито множество методов регуляризации [238–241]. По существу, все они основаны на введении короткомасштабного обрезания  $d$ , которое рассматривается как феноменологический параметр теории.

Следуя здесь этому подходу, наложим на волновую функцию нулевое граничное условие при  $r = d$ ,

$$g|_{r=d} = 0, \quad (3.69)$$

которое и определит дискретный спектр конвективных состояний.

Решение уравнения (3.62) дается функцией Уиттекера [221]. С точностью до нормировки,

$$g(r) = r^{-\frac{1}{2}} W_{-\frac{1}{2\kappa}, i\sqrt{\lambda}}(2\kappa r). \quad (3.70)$$

Согласно осцилляционной теореме Штурма [242], число связанных состояний с отрицательной энергией в точности равно числу узлов решения с нулевой энергией  $g(r; \kappa = 0)$  на интервале  $(d, \infty)$ . Интересно отметить, что  $g(r; \kappa = 0)$  принадлежит к дискретной части спектра. Состояние с нулевой энергией защищено горбом, который сформирован дальнедействующим хвостом кулоновского взаимодействия, который стремится к нулю сверху при  $r \rightarrow \infty$  [243]. Заметим, что  $g(r; \kappa = 0)$  выражается через функцию Макдональда [221]

$$g(r; \kappa = 0) = \mathcal{K}_{2i\sqrt{\lambda}}(2\sqrt{r}). \quad (3.71)$$

Это решение нормируемо, поскольку при  $r \rightarrow \infty$  оно ведет себя как  $g(r; \kappa = 0) \sim r^{-\frac{1}{4}} \exp(-2\sqrt{r})$ .

Из граничного условия (3.69) для  $g(r; \kappa = 0)$  определим критические амплитуды  $\Lambda_n$  связывающего потенциала:

$$x_n(2\sqrt{\Lambda_n}) = 2\sqrt{d}, \quad (3.72)$$

где  $x_n(\mu)$  есть  $n$ -й ноль функции  $\mathcal{K}_{i\mu}(x)$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . Тогда для заданного углового квантового числа  $m$  радиальное уравнение (3.62) имеет в точности  $n$  связанных решений, если и только если

$$\Lambda_n \leq \lambda_m(\mathcal{A}) < \Lambda_{n+1}. \quad (3.73)$$

Эти состояния нумеруются радиальным квантовым числом  $k$ , которое пробегает конечный набор значений,  $k = 1 \dots n$ .

Аналитическая оценка для энергии связи  $\varepsilon_{k,m}$  может быть получена при условии  $d \ll a_B$ , то есть  $d \ll 1$  в нормализованных единицах. Это условие обязано выполняться для чисто двумерной системы. Тогда при  $\lambda \gtrsim 1$  кулоновским отталкиванием  $1/r$  можно пренебречь по сравнению с притягивающим потенциалом  $-\lambda/r^2$  в области  $d < r \ll 1$ . Волновая функция в этой области, таким образом, равна

$$g(r) = \mathcal{K}_{i\sqrt{\lambda}}(\lambda r). \quad (3.74)$$

Спектр конвективных состояний, определенный из граничного условия (3.69), есть

$$|\varepsilon_{k,m}| = \frac{2Ry}{d^2} x_k^2 \left( \sqrt{\lambda_m(\mathcal{A})} \right). \quad (3.75)$$

Основному состоянию отвечают квантовые числа  $m = 0$ ,  $k = 1$ . Аналитическая аппроксимация для  $x_n(\mu)$  дана уравнением (B.7).

Для сравнения с представленными выше аналитическими результатами мы провели численное решение уравнения Шредингера (3.58) с регуляризованными потенциалами (3.53) и (3.54). Рисунок 3.11 показывает энергии трех конвективных квантовых состояний в различными квантовыми числами, а также кинетическую энергию центра масс как функцию параметра  $\mathcal{A}$ , который пропорционален рашбовскому параметру спин-орбиты и импульсу центра масс. Таким образом, линии на Рисунке 3.11 также представляют собой закон дисперсии конвективной связанной пары. Видно, что связанные состояния возникают в спектре при соответствующих критических значениях  $\mathcal{A}$ , а их энергия связи растет вместе с  $\mathcal{A}$ .

Уравнение (3.72) приводит к чуть большим критическим значениям  $\mathcal{A}$ , с качественно той же зависимостью  $E(\mathcal{A})$ , которая дается уравнением (3.75).

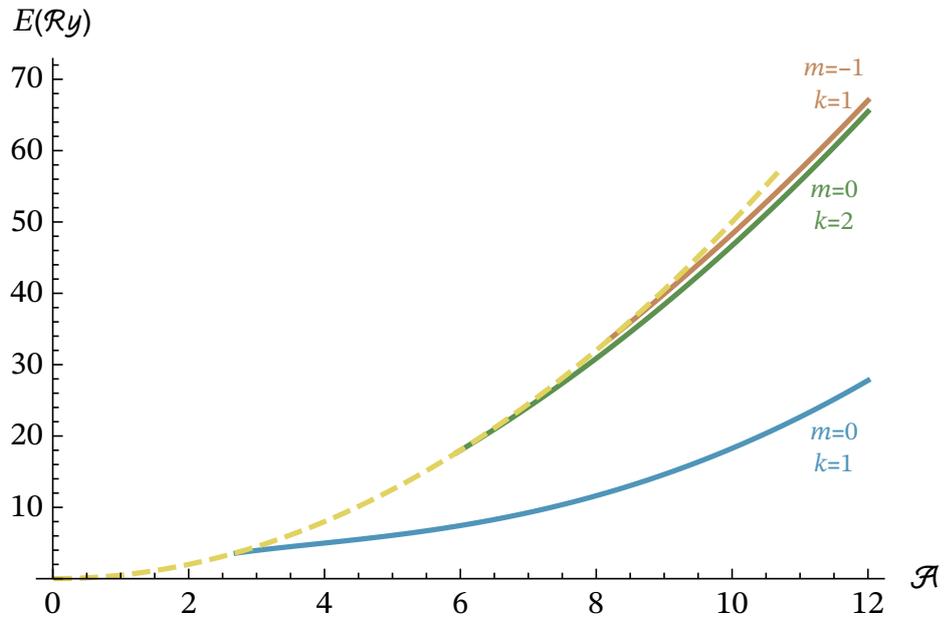


Рисунок 3.11 — Уровни энергии системы (сплошные линии) и кинетическая энергия центра масс (пунктир) в зависимости от  $\mathcal{A}$  при  $d = 0.25a_B$ .

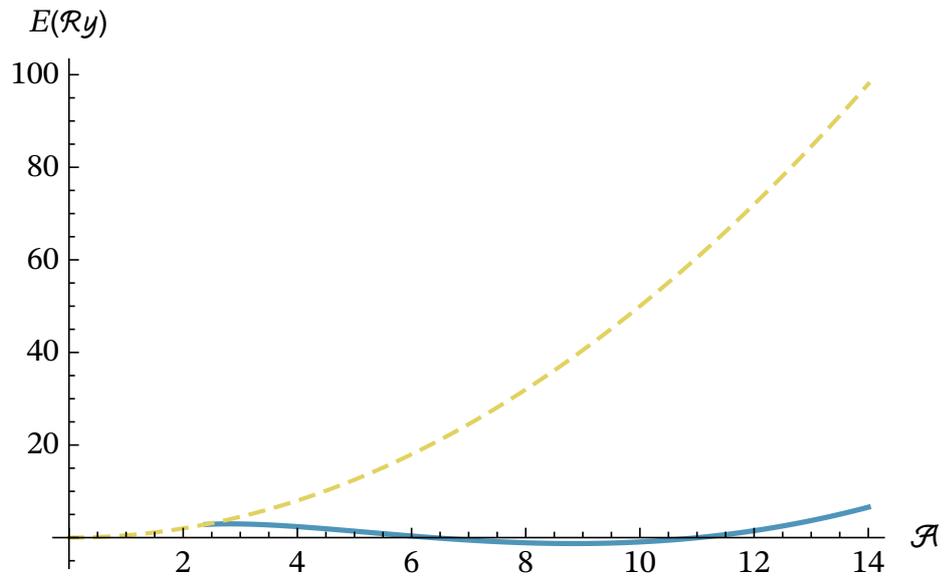


Рисунок 3.12 — Энергия основного состояния (сплошная линия) и кинетическая энергия центра масс (пунктир) в зависимости от  $\mathcal{A}$  при  $d = 0.2a_B$ .

Эффективная масса электронной пары существенно перенормируется за счет парного спин-орбитального взаимодействия, и при уменьшении  $d$  даже может стать отрицательной в определенной области  $K$ , как видно из Рисунка 3.12.

Две поверхности на Рисунке 3.13 показывают две компоненты спинорной волновой функции конвективного состояния,  $\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$  и  $\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ . Обратим внимание на сильную угловую зависимость решения, с пиками вокруг направления движения.

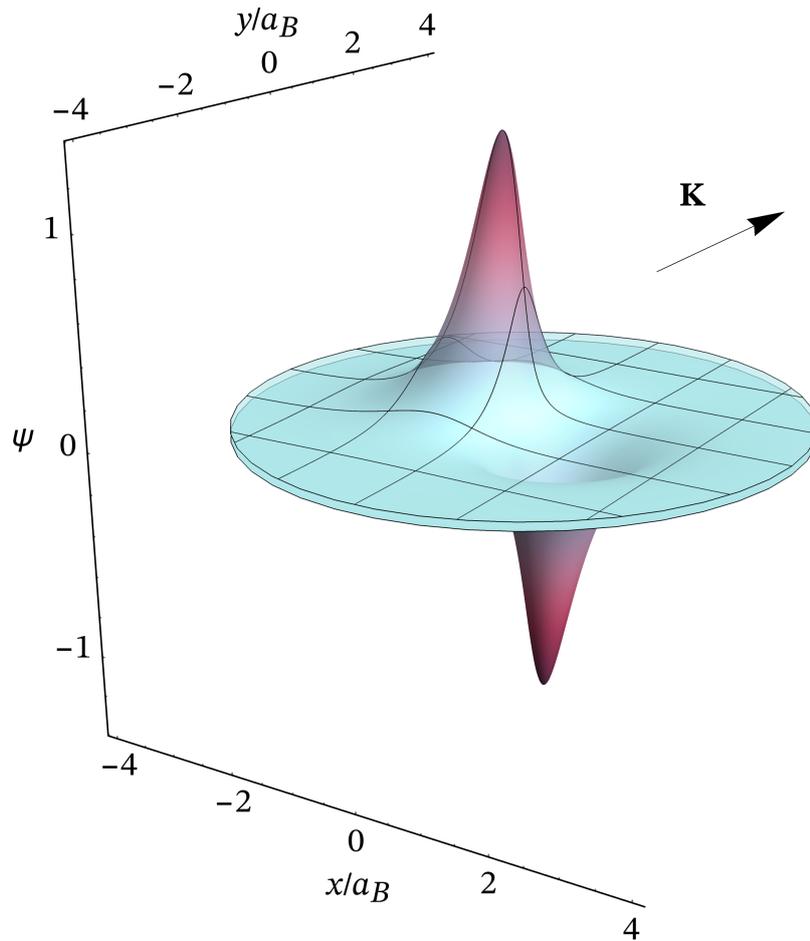


Рисунок 3.13 — Спинорные компоненты конвективной волновой функции для  $d = 0.25a_B$  и  $\mathcal{A} = 5$  в зависимости от относительных координат. Поверхности раздвинуты по вертикали на  $\delta = \pm 0.02$  для лучшего визуального восприятия. Стрелкой указано направление вектора  $\mathbf{K}$ .

В заключение этого раздела, подведем его итоги. Для двумерной электронной системы предложен новый механизм электронного спаривания, в основе которого лежит спин-орбитальная компонента электрон-электронного взаимодействия. Эффективное притяжение между электронами возникает в результате кулоновского взаимодействия электронов при их движении в определенной спиновой конфигурации. Этим оно принципиально отличается от известных механизмов электронного спаривания, использующих перенормировку электрон-электронного взаимодействия за счет многочастичных возбуждений [6] или вследствие образования отрицательной приведенной эффективной массы в материалах с инвертированными зонами [244]. Тот факт, что формирование связанных состояний определяется спином и импульсом взаимодействующих электронов, приводит к совершенно неординарным свойствам

этих связанных состояний. Мы показали, что существует два типа связанных состояний.

Релятивные связанные состояния определяются лишь относительным движением электронов. Энергия связи и структура состояния не зависят от движения пары как целого. В двумерных системах с чисто латеральным полем релятивные состояния образуются электронами с параллельными спинами.

Связанные состояния другого типа — это конвективные состояния. В отличие от релятивных состояний, они возникают исключительно благодаря движению центра масс, которое оказывается определяющим для относительного движения, энергетического спектра и пространственного распределения электронной плотности. Поразительное свойство этих состояний состоит в нетривиальной зависимости их энергии связи от полного импульса пары. При увеличении полного импульса  $K$ , энергия связи тоже растет и может стать настолько большой, что полная энергия пары начинает уменьшаться с  $K$ . Иными словами, в определенном диапазоне  $K$  эффективная масса пары становится отрицательной, что должно приводить к драматическим последствиям для коллективного поведения многоэлектронной системы.

### **3.4.3 Связанные электронные пары в симметричных двумерных слоях**

В предыдущем разделе изучалась симметричная двумерная электронная система в составе диэлектрически однородной структуры. Эта модель решается аналитически, что позволяет нам доказать существование связанных электронных пар, установить их общие свойства и оценить энергию связи. Между тем, как это обсуждалось выше, с точки зрения экспериментальной реализации значительно более интересной выглядит двумерная электронная система в тонком (моноатомном) слое, либо свободно подвешенном, либо погруженном в среду из слабого диэлектрика [19; 217; 218; 220]. Эта проблема интересна также и с точки зрения теории,

поскольку слабое диэлектрическое экранирование не только увеличивает потенциал взаимодействия, но и приводит к существенным изменениям в его пространственной зависимости, особенно на малых расстояниях между частицами [214; 216]. Последнее особенно важно в нашем случае, поскольку притяжение между электронами, обусловленное парным спин-орбитальным взаимодействием, определяется как величиной электрического поля, так и его координатной зависимостью.

В этом разделе мы изучим связанные электронные пары в тонких пленках с сильным спин-орбитальным взаимодействием [173]. Наш основной результат заключается в том, что слабое диэлектрическое экранирование электрон-электронного взаимодействия приводит к повышению энергии связи электронной пары на порядки величины.

Уравнения движения на спинорные компоненты волновой функции по-прежнему даются формулами (3.47) и (3.48), однако фигурирующее в них тангенциальное поле  $E_\tau(\mathbf{r})$  теперь определяется через потенциал Рытовой-Келдыша (3.25).

Начнем с анализа конвективных состояний. Измеряя полярный угол от направления  $\mathbf{K}$ , мы получим, что связывающий потенциал в уравнении (3.48) принимает вид

$$V(r, \phi) = \alpha E_\tau(r) K \sin \phi. \quad (3.76)$$

Его короткомасштабная асимптотика есть

$$V(r, \phi) \sim -\frac{Ze^2}{r} \sin \phi, \quad (3.77)$$

где введена безразмерная амплитуда спин-орбитального взаимодействия  $Z = \alpha K / (2\pi e \chi)$ . Для достаточно больших значений  $Z$ , связывающий потенциал (3.77) преобладает над слабо расходящимся отталкивающим потенциалом  $U(r) \sim \log(r/2\pi\chi)$ , и в спектре возникают связанные двухэлектронные состояния.

Интересно отметить, что благодаря диэлектрическому экранированию в слое, связывающий потенциал имеет кулоновскую асимптотику при малых  $r$ , в отличие от случая объемного экранирования, где связывающий потенциал расходится как  $r^{-2}$ . Следовательно, для решения уравнения (3.48) регуляризация не требуется.

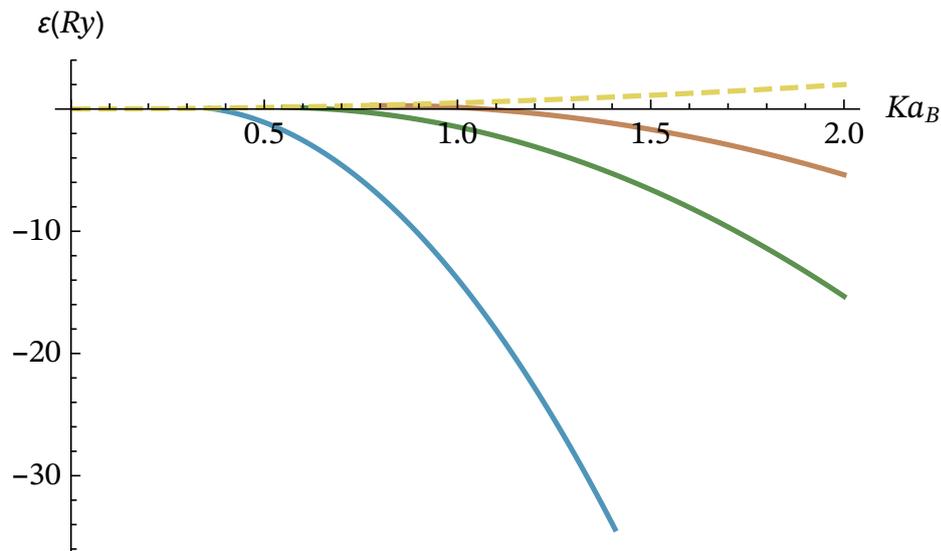


Рисунок 3.14 — Уровни энергии системы (сплошные линии) и кинетическая энергия центра масс (штриховая линия) в зависимости от  $Ka_B$ .

Воспользуемся аналогией с кулоновским потенциалом, чтобы грубо оценить энергию связи как  $|\varepsilon| \propto Z^2 \cdot Ry$ . Таким образом, энергия связи зависит от импульса центра масс как  $|\varepsilon| \propto K^2$ . Размер электронной пары можно оценить как  $\propto a_B/Z$ .

Разумеется, угловая зависимость связывающего потенциала вносит коррективы в эту оценку. Для того, чтобы их учесть, мы прибегнем к прямому численному решению уравнения движения с потенциалами (3.25) и (3.76). Для определенности, положим  $d = 0.2a_B$ .

На Рисунке 3.14 показаны энергии трех самых глубоких конвективных состояний, включая кинетическую энергию центра масс, в зависимости от импульса центра масс. При определенных критических значениях  $K$ , в спектре возникают связанные состояния, а энергия связи растет близко к  $K^2$ , в согласии с предыдущей оценкой.

При учете диэлектрического экранирования в слое, энергия связи возрастает примерно в  $\epsilon$  раз по сравнению со случаем диэлектрически однородной структуры, то есть на порядок величины. Отметим также обусловленную парным спин-орбитальным взаимодействием перенормировку эффективной массы электронной пары, которая даже становится отрицательной.

Рисунок 3.15 показывает волновые функции двух самых глубоких конвективных состояний. Поверхности, показанные разным цветом на рисунке, суть две спинор-

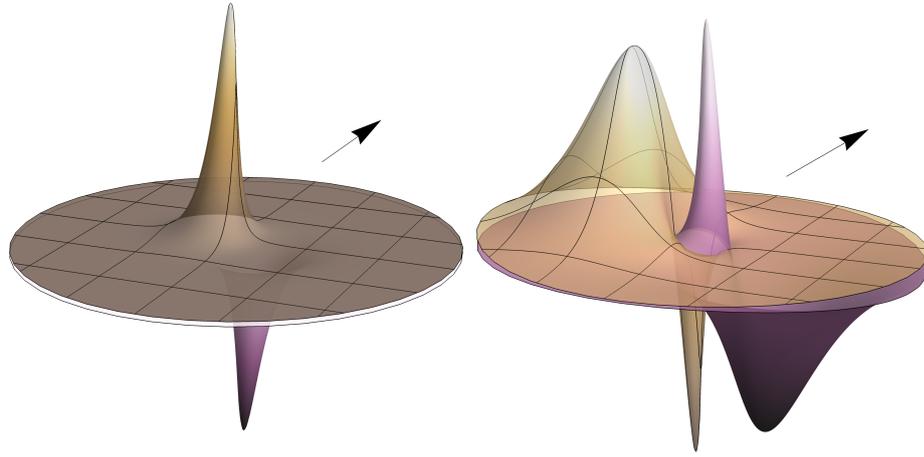


Рисунок 3.15 — Спинорные компоненты волновой функции конвективных состояний для основного состояния (слева) и первого возбужденного (справа) в зависимости от относительных координат. Стрелка указывает направление  $\mathbf{K}$ .

ные компоненты  $\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$  и  $\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ . Анизотропный связывающий потенциал (3.76) приводит к их нетривиальной угловой зависимости.

Как это и должно быть в симметричной двумерной системе, релятивные связанные состояния в слое представляют собой вырожденные триплетные пары с направлением спина, привязанным к орбитальному угловому моменту. Основному состоянию отвечает пара с наименьшим возможным значением проекции момента  $l = \pm 1$ :

$$\psi_{-}(\mathbf{r}) = (u(r)e^{-i\phi}, 0, 0, 0)^{\top} \quad (3.78)$$

и

$$\psi_{+}(\mathbf{r}) = (0, 0, 0, u(r)e^{i\phi})^{\top}. \quad (3.79)$$

Радиальная волновая функция  $u(r)$  подчиняется уравнению Шредингера

$$\left[ T_l + U(r) - 2\alpha \frac{E_{\tau}(r)}{r} \right] u(r) = \varepsilon_0 u(r), \quad (3.80)$$

где  $T_l$  обозначает кинетическую энергию, включая центробежный потенциал,

$$T_l = -\frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} \right), \quad l = 0, \pm 1, \dots \quad (3.81)$$

Связывающий потенциал, который создается парным спин-орбитальным взаимодействием, описывается последним членом в левой части уравнения (3.80). Фигурирующее в нем тангенциальное поле  $\mathbf{E}_{\tau}(\mathbf{r})$  определяется потенциалом

Рытовой-Келдыша из уравнения (3.25). Принимая во внимание короткомасштабную асимптотику  $E_\tau(\mathbf{r})$ , которая дается уравнением (3.28), мы заключаем, что связанные электронные пары формируются притягивающим потенциалом, который в области малых  $r$  ведет себя как

$$U(r) \sim -\frac{2\alpha e}{r_0 r^2}. \quad (3.82)$$

Электрон-электронное притяжение при достаточно большом  $\alpha$  преодолевает центробежный барьер, не говоря уже о более слабом отталкивающем потенциале Рытовой-Келдыша  $\propto \log \frac{r}{2\pi\chi}$ .

Обрезав потенциал (3.82) на  $r = d$ , мы получим оценку энергии связи релятивного состояния в двумерном слое:

$$|\tilde{\epsilon}_0| = \frac{x_1^2(\lambda)}{(d/a_B)^2}, \quad (3.83)$$

где  $x_1(\lambda)$  есть первый ноль функции Макдональда  $K_{i\lambda}(x)$ , а амплитуда притягивающего взаимодействия определена как

$$\lambda = \sqrt{\frac{4\tilde{\alpha}}{d/a_B} - 1}. \quad (3.84)$$

Связанные электронные пары возникают при условии  $\tilde{\alpha} > d/4a_B$ , которое выполняется в слоях на основе  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [17],  $\text{BiTeI}$  [18; 245] и  $\text{BiSb}$  [19], для которых  $\tilde{\alpha}$  порядка единицы [34]. Условимся в дальнейшем отмечать тильдой над буквой энергию, выраженную в единицах  $2Ry$ . Уравнение (3.83) дает оценку для величины  $|\epsilon_0|$  на уровне нескольких мЭВ.

### 3.4.4 Связанные электронные пары в двумерных слоях с затвором

В этом разделе мы исследуем общий и наиболее важный с практической точки зрения случай, когда парное спин-орбитальное взаимодействие создается совместно латеральной и нормальной компонентами электрического поля. В качестве модельной

системы мы рассмотрим тонкий слой материала с сильным рашбовским спин-орбитальным взаимодействием, отделенный от металлического затвора подложкой из слабого диэлектрика, как показано на Рисунке 3.2.

Главная физическая проблема, которая нас здесь интересует, это к каким эффектам приводит совместное действие нормального поля затвора и кулоновского поля в плоскости системы. В общем случае, это довольно трудная проблема, поскольку в ней относительное движение электронов не отделяется от движения центра масс, как в предыдущих разделах. Мы решили ее для случая электронной пары с нулевым полным импульсом и пришли к заключению, что поле в плоскости системы играет ключевую роль в формировании связанных электронных пар, а совместное действие латерального и нормального полей приводит к крайне неожиданным свойствам этих состояний.

Нормальное поле  $F(r)$  снимает вырождение пары релятивных состояний (3.78)–(3.79) и приводит к образованию двух новых состояний с различными свойствами. Наша наиболее интересная находка состоит в том, что в результате возникает устойчивое состояние, зарядовая и спиновая структура которого совершенно нечувствительна к изменению потенциала затвора. При приложении к затвору достаточно большого напряжения любого знака устойчивое состояние попадает в непрерывную часть спектра зонных состояний, и выживает там, оставаясь локализованным. Иными словами, в континуальном спектре возникает дельта-пик в плотности состояний, отвечающий дискретному уровню связанной электронной пары. Вторым образующимся состоянием, напротив, можно управлять, изменяя нормальное поле. Его энергия связи увеличивается, если к затвору приложить положительный потенциал, а отрицательный потенциал сдвигает состояние в континуум, где оно распадается.

## Устойчивое состояние

Прямое вычисление показывает, что антисимметричная комбинация вырожденных состояний (3.78)–(3.79)

$$\psi_{\text{robust}}(\mathbf{r}) = (u(r)e^{-i\phi}, 0, 0, -u(r)e^{i\phi})^T, \quad (3.85)$$

представляет собой *точное* решение полного гамильтониана

$$H = H_{\text{PSOI}} + U + T, \quad (3.86)$$

даже при учете нормального поля  $F(r)$  в парном спин-орбитальном взаимодействии (3.29). При этом радиальная функция  $u(r)$  по-прежнему определяется из уравнения (3.80), в котором потенциал взаимодействия  $U(r)$ , определяющий поле в плоскости  $\mathbf{E}_\tau(\mathbf{r})$ , дается уравнением (3.24), а нормальное поле выпадает из него вовсе. Отсюда следует, что ни распределение зарядовой и спиновой плотности, ни энергия  $\epsilon_0$  не зависят от нормального поля  $F(r)$ . Этот результат справедлив не только для рассматриваемой системы, конфигурация полей в которой подчиняется уравнениям (3.24) и (3.26), а является достаточно общим, при условии, что отсутствует внешнее поле, параллельное слою, и рассматриваются связанные электронные пары с нулевым полным импульсом.

Энергия связи отсчитывается от дна зоны проводимости  $\epsilon_c$ , который при наличии спин-орбитального взаимодействия смещается, если  $F_g \neq 0$ . Для связанной электронной пары положение дна зоны проводимости определяется формулой

$$\tilde{\epsilon}_c = -\frac{1}{4}\mathcal{F}_g^2, \quad (3.87)$$

где  $\mathcal{F}_g$  есть поле затвора  $F_g$  из уравнения (3.31), нормализованное следующим образом:  $\mathcal{F}_g = \tilde{\alpha}F_g/F_0$ , где  $F_0 = e/2\epsilon a_B^2$ . В одномерных квантовых проводах энергия связанных электронных пар всегда лежит ниже, чем  $\epsilon_c$  [171]. Для двумерных систем это, вообще говоря, не так. При увеличении  $F_g$  величина  $\epsilon_c$  уменьшается, а  $\epsilon_0$  остается неизменной, так что в определенный момент уровень  $\epsilon_0$  попадает в зону проводимости. Согласно

уравнению (3.80), устойчивое состояние остается локализованным даже при  $\varepsilon_0 > \varepsilon_c$ . Таким образом, в континууме возникает дискретный уровень, отвечающий связанной электронной паре.

### Управляемое состояние

В отличие от уравнения (3.85), симметричная комбинация уравнений (3.78)–(3.79) не является решением уравнения движения при  $F \neq 0$ . В точном решении возникают все четыре спинорные компоненты:

$$\psi_{\text{tunable}}(\mathbf{r}) = (u(r)e^{-i\phi}, v(r), -v(r), u(r)e^{i\phi})^T. \quad (3.88)$$

Такая форма решения гарантирует антисимметричность волновой функции по отношению к перестановке частиц. Радиальные компоненты волновой функции удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{cases} \left[ T_1 + V(r) - 2\alpha \frac{E_\tau(r)}{r} \right] u - \alpha \left[ 2F(r) \frac{d}{dr} + F'(r) \right] v = \varepsilon u \\ [T_0 + V(r)] v + \alpha \left[ 2F(r) \left( \frac{1}{r} + \frac{d}{dr} \right) + F'(r) \right] u = \varepsilon v, \end{cases} \quad (3.89)$$

которую следует решать с нулевыми условиями при  $r = d$  и на бесконечности. Нам больше всего интересует зависимость энергии связи от нормального электрического поля.

Аналитический подход к этой проблеме основан на том факте, что связанные электронные пары в сингулярном притягивающем потенциале  $\propto -1/x^2$  образуются на масштабе толщины слоя  $d$ , который предполагается много меньшим расстояния до затвора. На этом масштабе нормальное поле  $E_n(r)$  из уравнения (3.27) можно считать постоянным  $E_n(r) \approx E_n(0)$ , так что суммарное нормальное поле оказывается однородным,

$$F = E_n(0) + F_g = 4\pi n_g + 2E_n(0). \quad (3.90)$$

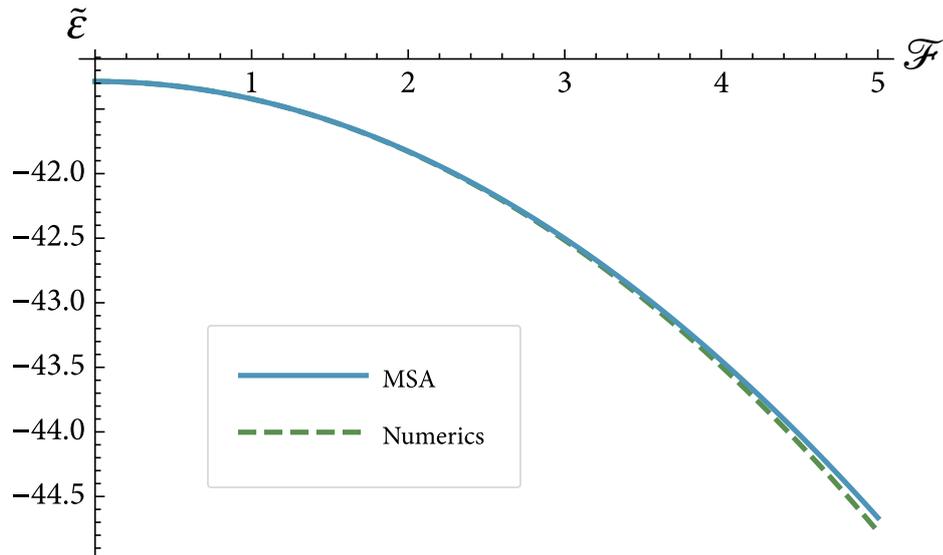


Рисунок 3.16 — Зависимость энергии связи от суммарного нормального поля. Здесь  $\tilde{\alpha} = 1$  и  $d = 0.25a_B$ . Результаты метода многих масштабов показаны сплошной линией.

Штриховой линией изображены результаты численных расчетов.

Кроме того, в этой области можно пренебречь слабым  $\sim \log r$  потенциалом отталкивания (3.24). Нормализуем все длины на  $a_B$  и обезразмерим суммарное нормальное поле согласно  $\mathcal{F} = \tilde{\alpha}F/F_0$ . Тогда система уравнений примет вид

$$\begin{cases} -u'' - \frac{1}{r}u' - \frac{\lambda^2}{r^2}u - \mathcal{F}v' = \tilde{\epsilon}u \\ -v'' - \frac{1}{r}v' + \mathcal{F}\left(u' + \frac{u}{r}\right) = \tilde{\epsilon}v. \end{cases} \quad (3.91)$$

Система точно решается при  $\mathcal{F} = 0$ . Однако, прямое пертурбативное разложение по степеням  $\mathcal{F}$  имеет весьма ограниченную область применимости, поскольку решение системы оказывается осциллирующим по  $\mathcal{F}$ , так что в разложении возникают секулярные члены. Вместо стандартной теории возмущений, мы воспользуемся методом многих масштабов [246; 247].

Учитывая, что разложение  $u$  должно начинаться с члена  $\mathcal{F}^0$ , и что при замене  $\mathcal{F} \rightarrow -\mathcal{F}$  пара функций  $(u, -v)$  по-прежнему удовлетворяет системе уравнений (3.91), мы заключаем, что разложение  $u$  должно проводиться по четным степеням  $\mathcal{F}$ , а разложение  $v$  — по нечетным. Введем наряду с  $r$  так называемый длинный масштаб  $\xi_2 = \mathcal{F}^2 f_2(r)$ , где неизвестная функция  $f_2(r)$  подлежит определению. В методе многих масштабов переменные  $r$  и  $\xi_2$  рассматриваются как независимые. Ограничившись

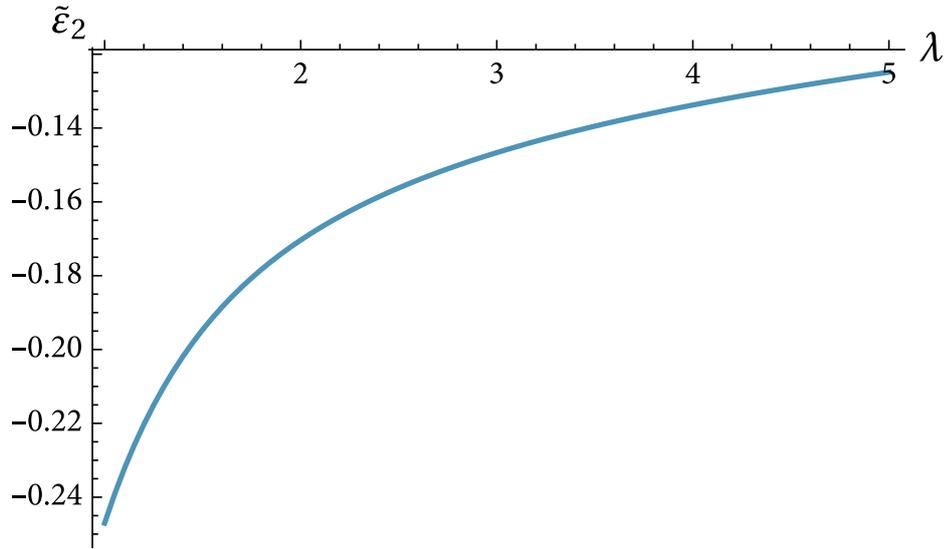


Рисунок 3.17 — Зависимость поправки второго порядка к энергии от амплитуды притягивающего потенциала.

разложением до второго порядка по  $\mathcal{F}$ , имеем

$$\begin{aligned} u(r) &= u_0(r, \xi_2) + \mathcal{F}^2 u_2(r, \xi_2) + \mathcal{O}(\mathcal{F}^4), \\ v(r) &= \mathcal{F} v_1(r, \xi_2) + \mathcal{O}(\mathcal{F}^3), \\ \tilde{\epsilon} &= \tilde{\epsilon}_0 + \mathcal{F}^2 \tilde{\epsilon}_2 + \mathcal{O}(\mathcal{F}^4). \end{aligned} \quad (3.92)$$

Производные в системе (3.91) даются формулами

$$\begin{aligned} \frac{du}{dr} &= \frac{\partial u_0}{\partial r} + \mathcal{F}^2 \left( f_2' \frac{\partial u_0}{\partial \xi_2} + \frac{\partial u_2}{\partial r} \right) + \mathcal{O}(\mathcal{F}^4), \\ \frac{d^2 u}{dr^2} &= \frac{\partial^2 u_0}{\partial r^2} + \mathcal{F}^2 \left( f_2'' \frac{\partial u_0}{\partial \xi_2} + 2f_2' \frac{\partial^2 u_0}{\partial r \partial \xi_2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial r^2} \right) + \mathcal{O}(\mathcal{F}^4), \\ \frac{dv}{dr} &= \mathcal{F} \frac{\partial v_1}{\partial r} + \mathcal{O}(\mathcal{F}^3), \\ \frac{d^2 v}{dr^2} &= \mathcal{F} \frac{\partial^2 v_1}{\partial r^2} + \mathcal{O}(\mathcal{F}^3). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Будем решать систему (3.91) последовательно в каждом порядке по  $\mathcal{F}$ .

$\mathcal{F}^0$ ) Уравнение на  $u_0$  имеет вид

$$-\partial_r^2 u_0 - \frac{1}{r} \partial_r u_0 - \frac{\lambda^2}{r^2} u_0 = -\kappa^2 u_0, \quad (3.94)$$

где мы обозначили  $\kappa = \sqrt{|\tilde{\epsilon}_0|}$ . Его решение есть

$$u_0 = A(\xi_2) K_{i\lambda}(\kappa r), \quad (3.95)$$

где  $A(\xi_2)$  — неизвестная функция, подлежащая определению. Спектр собственных значений энергии определяется из граничного условия  $u_0(d) = 0$ , что приводит к соотношению  $\kappa d = x_1(\lambda)$ , где  $x_1(\lambda)$  есть первый ноль функции Макдональда  $K_{i\lambda}(x)$ . Это приводит к уравнению (3.83) для  $\tilde{\varepsilon}_0$ .

$\mathcal{F}^1$ ) Уравнение для  $v_1$  таково:

$$-\partial_r^2 v_1 - \frac{1}{r} \partial_r v_1 + \partial_r u_0 + \frac{u_0}{r} = -\kappa^2 v_1. \quad (3.96)$$

Потребуем, чтобы его решение  $v_1(r, \xi_2) = A(\xi_2)w(r)$  определялось той же функцией от  $\xi_2$ , что и  $u_0$ . Решение, удовлетворяющее нулевому граничному условию при  $r = d$ , таково:

$$w(r) = K_0^{-1}(\kappa d) \left[ (K_0(\kappa r)I_0(\kappa d) - K_0(\kappa d)I_0(\kappa r)) \int_r^\infty K_0(\kappa \eta)g(\eta) d\eta + K_0(\kappa r) \int_d^r (K_0(\kappa \eta)I_0(\kappa d) - K_0(\kappa d)I_0(\kappa \eta)) g(\eta) d\eta \right], \quad (3.97)$$

где  $I_0(\kappa r)$  есть модифицированная функция Бесселя [221], и

$$g(\eta) = \kappa \eta K'_{i\lambda}(\kappa \eta) + K_{i\lambda}(\kappa \eta). \quad (3.98)$$

$\mathcal{F}^2$ ) Содержательно метод многих масштабов вступает в игру лишь на этом этапе. Уравнение на  $u_2$  имеет вид

$$-\partial_r^2 u_2 - \frac{1}{r} \partial_r u_2 - \frac{\lambda^2}{r^2} u_2 - \tilde{\varepsilon}_0 u_2 = f_2'' \frac{\partial u_0}{\partial \xi_2} + 2f_2' \frac{\partial^2 u_0}{\partial r \partial \xi_2} + \frac{1}{r} f_2' \frac{\partial u_0}{\partial \xi_2} + \tilde{\varepsilon}_2 u_0 + A(\xi_2) \frac{\partial w}{\partial r}. \quad (3.99)$$

Суть метода заключается в том, чтобы потребовать тождественного обращения в нуль правой части, с тем чтобы избежать появления секулярных членов в  $u_2$  [246].

Подставим сюда выражение (3.95) для  $u_0$  и получим

$$\frac{A'(\xi_2)}{A(\xi_2)} = - \frac{\tilde{\varepsilon}_2 K_{i\lambda}(\kappa r) + \frac{\partial w}{\partial r}}{f_2'' K_{i\lambda}(\kappa r) + f_2' \left( 2\kappa K'_{i\lambda}(\kappa r) + \frac{1}{r} K_{i\lambda}(\kappa r) \right)}. \quad (3.100)$$

Переменные  $r$  и  $\xi_2$  в этом уравнении разделяются, так что обе его части равны одной и той же константе, которую без ограничения общности можно положить равной единице, поскольку она в любом случае выпадает из ответа. Тогда

$$f_2'(r) = \frac{1}{r K_{i\lambda}^2(\kappa r)} \int_d^r \eta K_{i\lambda}^2(\kappa \eta) \left( \tilde{\varepsilon}_2 + \frac{1}{K_{i\lambda}(\kappa \eta)} \frac{\partial w}{\partial \eta} \right) d\eta. \quad (3.101)$$

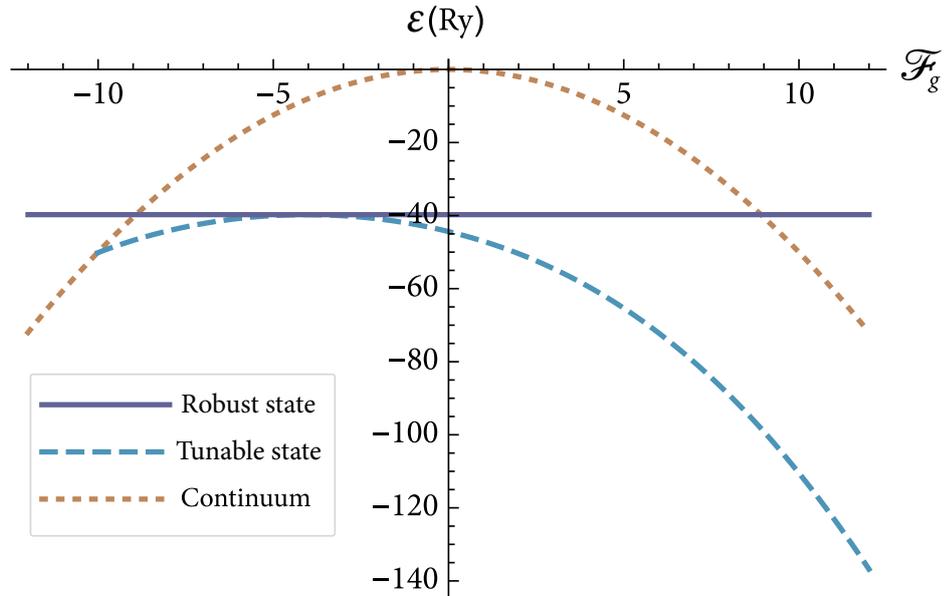


Рисунок 3.18 — Зависимость энергии связанных электронных пар, а также дна зоны проводимости, от нормализованного поля затвора. Здесь  $\tilde{\alpha} = 1$ ,  $\chi = 0.4a_B$ ,  $d = 0.25a_B$  и  $a = a_B$ .

Чтобы избежать секулярного роста функции  $f'_2(r)$  при  $r \rightarrow \infty$ , должно быть

$$\tilde{\varepsilon}_2 = -\frac{\int_d^\infty \eta K_{i\lambda}(\kappa\eta) \frac{\partial w}{\partial \eta} d\eta}{\int_d^\infty \eta K_{i\lambda}^2(\kappa\eta) d\eta}. \quad (3.102)$$

Это и есть окончательный результат. Зависимость энергии управляемого состояния  $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_0 + \mathcal{F}^2 \tilde{\varepsilon}_2$  от суммарного нормального поля  $\mathcal{F}$  показана на Рисунке 3.16. Для сравнения там же приведен результат численного решения системы (3.91). Хорошее согласие имеет быть вплоть до  $\mathcal{F} = 5$ , причем с увеличением  $\lambda$  эта область расширяется.

Зависимость поправки к энергии второго порядка  $\tilde{\varepsilon}_2(\lambda)$  от амплитуды связывающего потенциала показана на Рисунке 3.17. Чем больше  $\lambda$ , тем более пологой оказывается зависимость энергии от нормального поля. Иными словами, глубокое состояние практически нечувствительно к нормальному полю.

При большом  $\lambda$  оказывается  $|\tilde{\varepsilon}_2| < 0.25$ , что означает, что кривая  $\tilde{\varepsilon}_c(\mathcal{F}_g) = -\mathcal{F}_g^2/4$ , указывающая положение дна зоны проводимости, идет круче, чем уровень энергии управляемого состояния  $\tilde{\varepsilon}(\mathcal{F}) = \tilde{\varepsilon}_0 + \mathcal{F}^2 \tilde{\varepsilon}_2$ . Кроме того, вершины этих парабол смещены друг относительно друга по горизонтали в соответствии с уравнением (3.90).

Следовательно, эти кривые пересекаются в некоторой точке, где уровень энергии управляемого состояния (3.88) попадает в зону проводимости.

Легко видеть, что, попав в зону проводимости, управляемое состояние распадается. В самом деле, асимптотическое решение системы уравнений (3.89) в области  $r \rightarrow \infty$  имеет вид  $u(r) \sim K_1(kr)$  и  $v(r) \sim iK_0(kr)$ , где

$$k = i\sqrt{|\tilde{\varepsilon}_c|} + \sqrt{\tilde{\varepsilon}_c - \tilde{\varepsilon}}. \quad (3.103)$$

Как только  $\tilde{\varepsilon} > \tilde{\varepsilon}_c$ ,  $k$  становится чисто мнимой величиной, что влечет делокализацию решения.

Для произвольной величины нормального электрического поля связанные электронные пары изучались путем численного решения системы уравнений (3.89) с точными значениями потенциала взаимодействия и поля из уравнений (3.24) и (3.26) во всей области изменения  $r$ . Расчеты подтверждают результаты метода многих масштабов. На Рисунке 3.18 изображены уровни энергии устойчивого состояния (3.85) и управляемого состояния (3.88) в зависимости от нормализованного поля затвора. Дополнительно показано положение дна зоны проводимости. При большом отрицательном напряжении, приложенном к затвору, управляемое состояние попадает в непрерывную часть спектра и распадается, в то время как положительное напряжение на затворе способствует спариванию, приводя к увеличению энергии связи. Энергия связи устойчивого состояния, отсчитанная от дна зоны проводимости  $\varepsilon_c$ , уменьшается при приложении напряжения к затвору, так что при достаточно большом напряжении любой полярности уровень энергии попадает в непрерывную часть спектра, но устойчивое состояние остается связанным и локализованным даже в континууме.

В заключение, подведем итоги этого раздела. Мы изучали связанные электронные пары, возникающие благодаря парному спин-орбитальному взаимодействию, в наиболее реалистичной и интересной ситуации двумерного слоя с затвором, где парное спин-орбитальное взаимодействие создается кулоновскими полями, имеющими как нормальную компоненту, так и компоненту в плоскости системы. Основным вопросом состоял в том, к каким эффектам приводит совместное действие

этих компонент, каждая из которых способствует образованию двухчастичных связанных состояний с, вообще говоря, различными спиновыми конфигурациями. Проблема дополнительно осложняется тем, что относительное движение электронов в ней не разделяется с движением центра масс. Мы детально изучили связанные электронные пары с нулевым полным импульсом и обнаружили, что совместное действие латеральной и нормальной компонент поля приводит к совершенно неожиданным результатам.

Нормальное поле снимает вырождение триплетной пары связанных состояний, созданных полем в плоскости. Одним из образующихся состояний с большей энергией связи можно управлять, изменяя напряжение на затворе. Энергия связи этого состояния заметно растет при положительном приложенном напряжении, а его зарядовая и спиновая структура непрерывно меняется с изменением  $\mathcal{F}_g$ .

Напротив, второе состояние демонстрирует абсолютно неожиданное поведение. Его спиновая и зарядовая структура совершенно не зависят от напряжения на затворе, а его энергия меняется в точности так же, как потенциал двумерного слоя. Энергия связи, отсчитанная от дна зоны проводимости, уменьшается с ростом напряжения на затворе, так что при больших  $\mathcal{F}_g$  уровень энергии попадает в континуум зонных состояний. Интересно, что это состояние остается связанным и локализованным, даже оказавшись в непрерывном спектре. Тот факт, что это состояние оказывается настолько устойчивым по отношению к нормальному электрическому полю, свидетельствует о том, что поле в плоскости системы играет ключевую роль в формировании связанных электронных пар по сравнению с нормальной компонентой.

### 3.4.5 Кулоновская примесь в двумерных материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием

Примеси играют чрезвычайно важную роль при изучении свойств новых материалов не только потому, что во многих случаях они в значительной мере изменяют фундаментальные свойства последних (хороший пример здесь — это нарушение квантования проводимости в краевых состояниях в топологических изоляторах [248; 249]), но главным образом потому, что именно в электронной структуре примесных состояний и проявляются качественно новые свойства материалов. Укажем в качестве примера феномен падения электронов на центр при наличии примесей с критическим зарядом в графене [188; 235], нетривиальную электронную структуру примесных состояний в 3D и 2D топологических изоляторах [250–252], многочисленные проявления примесных состояний в свойствах дихалькогенидов переходных металлов [253], и так далее.

Материалы с сильным спин-орбитальным взаимодействием в последнее время исследуются чрезвычайно широко [34; 35]. Тем не менее, до сих пор мало что известно об электронных состояниях примесей, специфических именно для таких материалов, хотя процессы рассеяния, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием, которое порождается заряженными примесями в этих материалах, изучались весьма пристально [198; 254; 255] в связи с тем, что спин-зависимое рассеяние, возникающее благодаря спин-орбитальному взаимодействию, является основным механизмом несобственного спинового эффекта Холла [39]. Однако, недавние исследования показали, что в материалах с сильным эффектом Рашбы энергия спин-орбитального взаимодействия, порожденного кулоновским полем точечного заряда, оказывается сравнимой с кулоновской энергией [175], причем для определенной ориентации спина и импульса электрона эта его компонента взаимодействия с зарядом оказывается притягивающей. Следовательно, такое спин-орбитальное взаимодействие не

только значительно изменяет связанные состояния в кулоновском потенциале, но и приводит к образованию новых связанных состояний [256].

При изучении этого нетривиального механизма образования связанных состояний важно принять во внимание тот факт, что сильное спин-орбитальное взаимодействие возникает в результате гибридизации базисных блоховских состояний с различной спиновой конфигурацией, поэтому исследование должно базироваться на многозонной модели, которая адекватно описывает сильное спин-орбитальное взаимодействие. В качестве таковой мы используем четырехзонную модель, хорошо обоснованную для широкого класса материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием.

В этом разделе мы показываем, что спин-орбитальное взаимодействие, создаваемое электрическим полем примеси, может быть эффективным механизмом образования связанных состояний с большой энергией связи и специфической спиновой структурой. Связанное состояние образуется в результате того, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к эффективному притяжению электрона к заряду любого знака.

Механизм такого притяжения был предложен нами ранее при исследовании парного взаимодействия электронов в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием [175] и изучен в рамках однозонного приближения [171; 172]. Притяжение возникает из-за того, что спин-орбитальное взаимодействие понижает энергию электронов при определенной конфигурации спинов, связанной с их импульсами. Парное спин-орбитальное взаимодействие, будучи пропорциональным электрическому полю заряда, с которым взаимодействует электрон, увеличивается при уменьшении расстояния  $r$  между электроном и зарядом как  $r^{-2}$ , а кулоновское отталкивание — как  $r^{-1}$ , так что на малом расстоянии спин-орбитальное притяжение становится сильнее отталкивания. Это и приводит к спариванию электронов, но при этом возникает проблема, связанная с тем, что из-за расходимости поля решение теряет устойчивость (происходит так называемое падение на центр), для стабилизации которой необходимо выйти за рамки однозонного приближения и корректно включить в расчет спин-орбитальное взаимодействие без использования

низкоэнергетического приближения. Эту задачу мы и решаем в настоящем разделе применительно к заряженному центру.

Для описания материала с сильным спин-орбитальным взаимодействием мы используем двумерную модель Берневига-Хьюза-Жанга (BHZ) [183], которая является наиболее адекватной и достаточно простой континуальной моделью, применимой к широкому классу материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием и зонной структурой, сформированной за счет  $sp^3$  гибридизации. Эта модель построена в рамках  $k \cdot p$  приближения и потому хорошо подходит для детального изучения связанных состояний. Она описывает как тривиальные полупроводники с сильным спин-орбитальным взаимодействием, так и топологическую фазу. Будучи чисто двумерной, эта модель корректно учитывает эффекты электрического поля в плоскости слоя, в частности, создаваемое таким полем рашбовское спин-орбитальное взаимодействие. Заряд примеси в рамках такой модели можно рассматривать как источник внешнего поля, но при этом необходимо иметь в виду, что реально заряд может быть расположен в любой точке по толщине слоя, а не в его середине. Это приводит к нарушению симметрии инверсии относительно нормали к слою и появлению спин-орбитального взаимодействия, которое определяется нормальной компонентой электрического поля  $\mathcal{E}_z$ . Наши оценки показывают, что нормальная компонента кулоновского поля в слое может быть настолько велика, что создаваемое им рашбовское спин-орбитальное взаимодействие значительно изменяет энергию электрона. В результате оказывается, что именно эта компонента спин-орбитального взаимодействия играет решающую роль в образовании новых состояний.

Обобщение первоначальной модели BHZ при наличии нормального электрического поля было сделано в работе [257]. Мы воспользуемся обобщенной таким образом моделью, рассматривая примесь как источник внешнего поля, двумерный потенциал которого  $U$  и нормальная компонента электрического поля  $\mathcal{E}_z$  усреднены по толщине слоя.

Четырехзонный (с учетом спина) гамильтониан модели BHZ представляется на базисе ( $|E+\rangle$ ,  $|H+\rangle$ ,  $|E-\rangle$ ,  $|H-\rangle$ ), где  $|E\pm\rangle$  и  $|H\pm\rangle$  суть базисные состояния электронных

и дырочных зон с угловым моментом  $\pm 1/2$  и  $\pm 3/2$ , соответственно:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} M(k) & Ak_+ & -i\xi e \mathcal{E}_z k_- & 0 \\ Ak_- & -M(k) & 0 & 0 \\ i\xi e \mathcal{E}_z k_+ & 0 & M(k) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -M(k) \end{bmatrix} + U(r)I, \quad (3.104)$$

где  $k$  есть импульс,  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ,  $M(k) = M - Bk^2$ , а  $M, B, A$  — параметры модели. Для простоты рассматриваем модель симметричную относительно электронной и дырочной зон при отсутствии рашбовского спин-орбитального взаимодействия. Топологическая фаза реализуется при  $MB > 0$ , тривиальная — при  $MB < 0$ . Далее,

$$\mathcal{E}_z = \frac{Ze}{\epsilon d} \left( \frac{1}{\sqrt{r^2 + \delta^2}} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + (d - \delta)^2}} \right), \quad (3.105)$$

и

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{\epsilon d} \left( \operatorname{arctanh} \frac{d - \delta}{\sqrt{r^2 + (d - \delta)^2}} + \operatorname{arctanh} \frac{\delta}{\sqrt{r^2 + \delta^2}} \right), \quad (3.106)$$

где  $d$  — толщина слоя,  $Z$  — заряд примеси в единицах  $e$ ,  $\delta$  — расстояние от примеси до границы слоя,  $\epsilon$  — диэлектрическая константа материала. Эрмитовость гамильтониана при неоднородном нормальном поле обеспечивается заменой в уравнении (3.104)  $\mathcal{E}_z k_{\pm}$  на антикоммутатор  $\frac{1}{2}(k_{\pm} \mathcal{E}_z + \mathcal{E}_z k_{\pm})$ .

В уравнении (3.104)  $\xi$  — параметр рашбовского спин-орбитального взаимодействия, которое, как видно, связывает только электронные базисные состояния. Поэтому рашбовское спин-орбитальное взаимодействие действует несимметрично на состояния зоны проводимости и валентной зоны, вследствие чего изучаемый нами механизм притяжения несимметричен относительно знака заряда примеси и инверсии электронной и дырочной зон. По этой причине связанные состояния различны в топологической и тривиальной фазах.

Собственные функции гамильтониана (3.104) суть

$$\Psi = e^{il\varphi} (\psi_1(r), i\psi_2(r)e^{-i\varphi}, \psi_3(r)e^{i\varphi}, i\psi_4(r)e^{2i\varphi})^T, \quad (3.107)$$

где целое  $l$  есть угловое квантовое число.

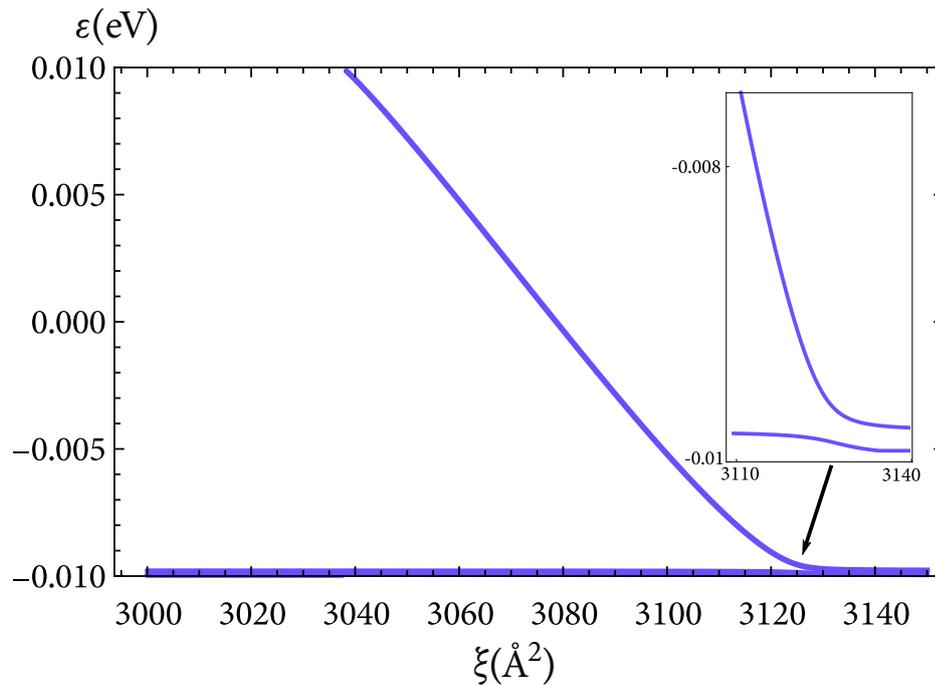


Рисунок 3.19 — Собственные значения энергии для  $l = 0$  в щели в зависимости от  $\xi$ . Тривиальная фаза, отрицательно заряженная примесь с  $Z = -2$ .

Задача решается численными методами, так как аналитическое решение задачи сопряжено со значительными трудностями. Параметры системы выбраны близкими к таковым в квантовых ямах на основе HgTe/CdTe:  $M = 0,01$  eV,  $A = 5$  ÅeV,  $B = -50$  Å<sup>2</sup> eV,  $\epsilon = 20$ ,  $d = 50$  Å и  $\delta = 3$  Å.

Сначала рассмотрим отрицательно заряженную примесь в тривиальной фазе. Результаты расчета показаны на Рисунке 3.19. При малом параметре рашбовского спин-орбитального взаимодействия  $\xi$  имеются только мелкие состояния вблизи валентной зоны, спектр которых на рисунке малоразрешим и специально не изучался, так как они не представляют сейчас особого интереса. Но при критическом значении  $\xi$  у дна зоны проводимости появляется новое состояние, уровень энергии которого быстро уходит вглубь щели с ростом  $\xi$ . Далее при увеличении  $\xi$  это состояние гибридизуется с мелкими состояниями, как показано на вставке, и происходит их антикроссинг.

Этот результат ясно указывает на следующую картину формирования спектра. На качественном уровне будем считать, что потенциал примеси достаточно плавный и приводит к искажению краев зон. При этом имеем в виду, что помимо кулоновского потенциала, действующего на обе зоны, имеется еще и эффективный потенциал

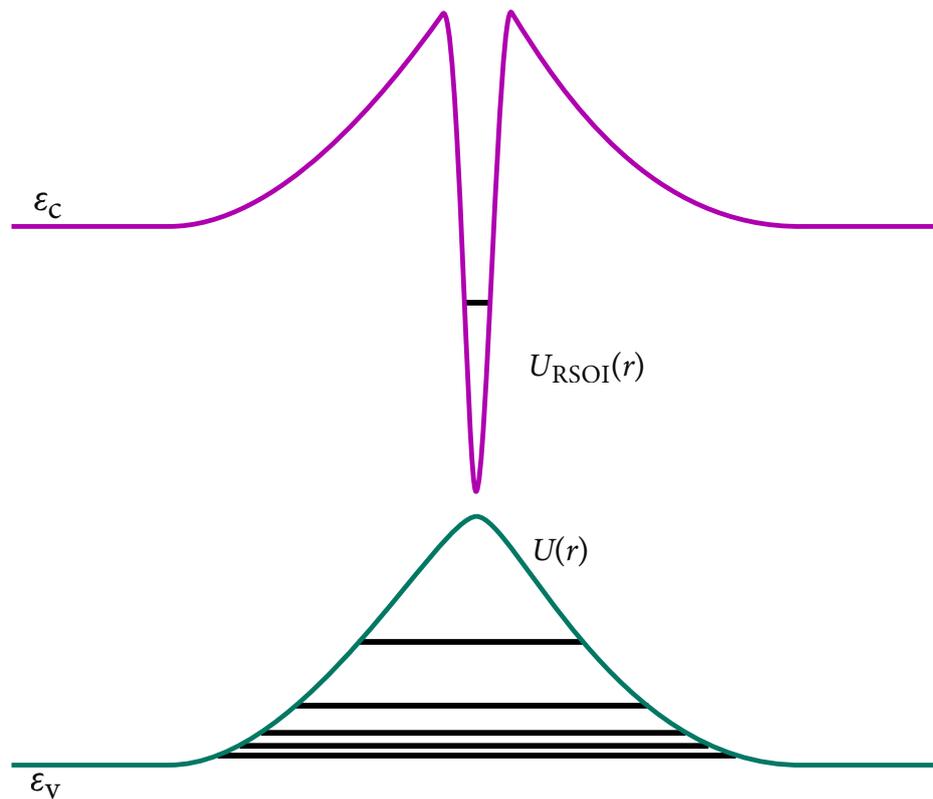


Рисунок 3.20 — Схематическое изображение искажения краев зоны проводимости  $\varepsilon_c$  и валентной зоны  $\varepsilon_v$  кулоновским полем отрицательно заряженной примеси  $U(\mathbf{r})$  и эффективным потенциалом рашбовского спин-орбитального взаимодействия  $U_{\text{RSOI}}(\mathbf{r})$ .

рашбовского спин-орбитального взаимодействия, действующий на электронные состояния, которые в тривиальной фазе формируют зону проводимости. Кулоновский потенциал сдвигает энергию края обеих зон вверх, как это показано на Рисунке 3.20, а рашбовское спин-орбитальное взаимодействие — вниз, и при достаточно большом параметре  $\xi$  создает на профиле дна зоны проводимости яму малого радиуса по сравнению с масштабом кулоновского потенциала.

Кулоновский потенциал создает мелкие состояния вблизи потолка валентной зоны, а спин-орбитальный потенциал, если его величина больше критической, создает сильно локализованное состояние с энергией вблизи дна зоны проводимости. Его энергия понижается при увеличении  $\xi$ , то есть уровень становится глубже. В принципе, в узкой яме может быть несколько уровней, сильно разделенных по энергии. Это следует и из результатов численных расчетов, не приведенных здесь.

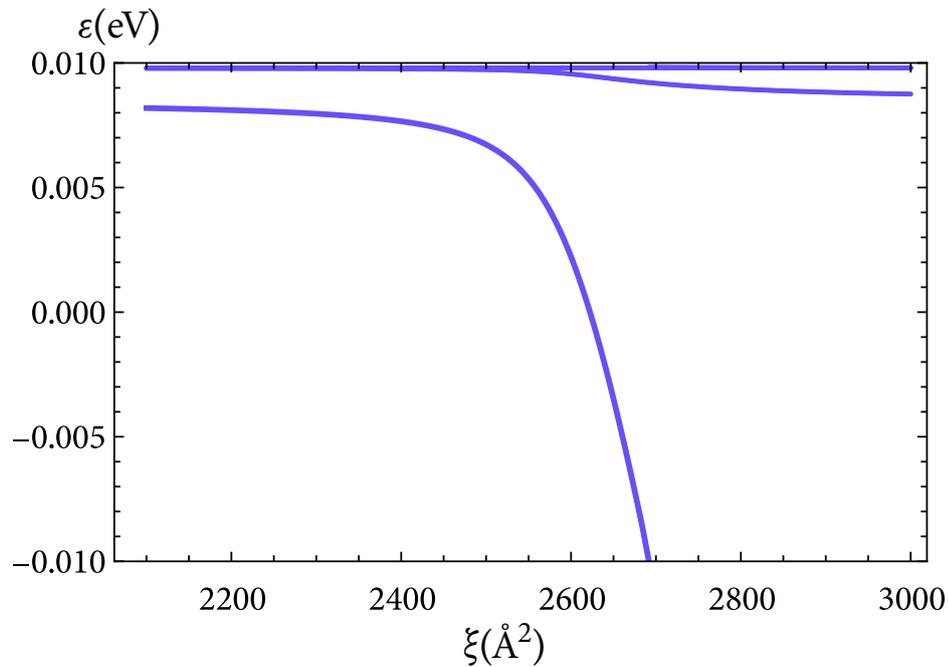


Рисунок 3.21 — Собственные значения энергии для  $l = 0$  в щели в зависимости от  $\xi$ . Тривиальная фаза, положительно заряженная примесь с  $Z = +2$ .

Однако такие состояния, по-видимому, не очень интересны, так как для их реализации требуется очень большой параметр  $\xi$  или заряд примеси.

Результаты, показанные на Рисунке 3.19 в качестве иллюстрации, были получены для отрицательно заряженной примеси с  $Z = -2$ . Разумеется, предложенный механизм формирования связанных состояний за счет спин-орбитального взаимодействия работает для заряда любой величины и знака. При изменении величины заряда примеси критическое значение параметра  $\xi$  меняется как  $1/|Z|$ , а энергия связи образующихся состояний растет вместе с  $|Z|$ . Величина эффективного заряда примеси в реальных материалах зависит от их электронной структуры и связей с материалом хоста, так что значение  $Z = 1 \dots 2$  представляется разумной оценкой.

При изменении знака заряда спектр изменяется так, как показано на Рисунке 3.21. Мелкие уровни образуются вблизи дна зоны проводимости, а при достаточно большом параметре спин-орбитального взаимодействия нижний из этих уровней резко опускается и с ростом  $\xi$  достигает зоны валентной зоны. Такое поведение спектра легко понять из приведенной выше качественной картины, если учесть, что кулоновский потенциал создает яму профиля дна зоны проводимости, а спин-

орбитальное взаимодействие эту яму сильно углубляет в малой области пространства вблизи центра.

Аналогичные результаты получены также и для топологической фазы. Основное качественное отличие от рассмотренного случая состоит в том, что за счет инверсии электронной и дырочной зон эффективная квантовая яма, которую создает спин-орбитальное взаимодействие, формируется по отношению к валентной зоне. В соответствии с этим, меняются спектр связанных состояний и их зависимость от  $\xi$ . В целом же, картина и количественные оценки близки к полученным для тривиальной фазы.

В заключение, подведем итоги раздела. Мы показали, что спин-орбитальное взаимодействие, создаваемое электрическими полями заряженных примесей, может приводить к образованию связанных состояний, специфических для двумерных материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Механизм их образования связан с притяжением электрона к заряду любого знака, возникающим благодаря спин-орбитальному взаимодействию, создаваемому нормальной компонентой кулоновского поля заряда. При этом важно, чтобы расположение примеси локально нарушало симметрию инверсии структуры в направлении, перпендикулярном к слою. Однако возможная асимметрия пространственной инверсии в объеме, вдали от примеси, принципиального значения не имеет, хотя и оказывает влияние как на изучаемые нами состояния, так и на традиционные состояния в кулоновском потенциале. Этот последний эффект изучался ранее для топологической фазы [258] и здесь не рассматривался.

Предложенный механизм образования связанных состояний является достаточно общим и может реализоваться не только в материалах, описываемых моделью ВNZ, с точечными дефектами. В материалах типа HgTe/CdTe, по нашим оценкам, критическое значение параметра  $\xi$  порядка  $2,5 \cdot 10^3 \text{ \AA}^2$ , что почти вдвое больше значения  $\xi$ , известного для таких структур. В других материалах с более сильным спин-орбитальным взаимодействием, типа BiTeI, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, BiSb/AlN [17—19; 259], и для других структурных дефектов с большим зарядом [188] или в специально созданных структурах, например, методами зондовой микроскопии, такой механизм образо-

вания связанных состояний вполне реализуем, но его изучение и количественные оценки нуждаются в других модельных подходах.

### 3.5 Заключение

В этой главе мы представили новый взгляд на роль спин-орбитального взаимодействия в кристаллических твердых телах, связанный с наличием парного спин-орбитального взаимодействия, и обсудили проявления парного спин-орбитального взаимодействия в наиболее актуальных низкоразмерных структурах. Центральная тема — это появление неожиданно сильной составляющей парного взаимодействия электронов, которая определяется их спинами и импульсами, а также величиной и конфигурацией кулоновских полей электронов. В кристаллах парное спин-орбитальное взаимодействие возникает аналогично спин-орбитальной компоненте гамильтониана Брейта-Паули в релятивистской квантовой теории. Важным отличием является то, что компонента парного спин-орбитального взаимодействия, вызванная в теории Брейта магнитным полем движущихся электронов, в кристаллах чрезвычайно мала, тогда как компонента, которая обусловлена кулоновским электрическим полем электронов, напротив, очень велика, как и спин-орбитальное взаимодействие Рашбы. Соответственно, парное спин-орбитальное взаимодействие оказывается важным в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы.

Парное спин-орбитальное взаимодействие имеет несколько замечательных особенностей. Наиболее интересная из них — это притяжение электронов, которое зависит от спинов и импульсов взаимодействующих частиц. Полный спектр возможных эффектов, которые могут возникнуть из-за парного спин-орбитального взаимодействия, еще предстоит выяснить. Но уже ясно, что притяжение, обусловленное парным спин-орбитальным взаимодействием, приводит к образованию двухэлектронных связанных состояний. Существует два механизма спаривания,

которые приводят к образованию связанных электронных пар разных типов. Парное спин-орбитальное взаимодействие, возникающее из-за относительного движения электронов в паре, порождает релятивные состояния, свойства которых не зависят от движения пары в целом. Кроме того, для определенной спиновой конфигурации спин-орбитальное взаимодействие создает притяжение, которое напрямую зависит от полного импульса пары и исчезает, когда этот импульс равен нулю. Таким образом, когда полный импульс достаточно велик, возникают конвективные связанные состояния. Это наиболее необычный эффект парного спин-орбитального взаимодействия. Насколько нам известно, в квантовой механике такой механизм образования связанных состояний до сих пор не встречался.

Другой особенностью связанных электронных пар, образованных парным спин-орбитальным взаимодействием, является то, что их энергия связи, а также спиновая и орбитальная структура нетривиальным образом зависят от диэлектрической среды и наличия металлического затвора. Это связано с тем, что притяжение создается не потенциалом, а электрическим полем, величина и пространственная конфигурация которого изменяются под воздействием вышеуказанных факторов. Влияние диэлектрического экранирования и затворов было изучено для широкого спектра актуальных на данный момент конструкций: одномерных квантовых проводов с затвором, свободно подвешенных двумерных слоев, двумерных систем в диэлектрически однородной среде, и двумерных слоев с затвором. Диэлектрическое экранирование уменьшает энергию связи, тем сильнее, чем больше поляризуемость слоя или проволоки. Кроме того, диэлектрическое экранирование приводит к качественному изменению распределения электронной плотности в пространстве. Но наибольший интерес представляет эффект затвора, который создается как зарядами изображения, индуцируемыми на затворе взаимодействующими электронами, так и приложенным к нему напряжением. В одномерных квантовых проводах, где связанные состояния возникают только благодаря зарядам изображения, электрическое поле, создаваемое напряжением затвора, приводит к значительному увеличению энергии связи. В двумерных системах, где связанные состояния формируются за счет кулоновских полей в плоскости системы, электрическое поле затвора кардинальным

образом их модифицирует, особенно в случае, когда основное состояние является вырожденным при нулевом напряжении на затворе. Таким образом, затвор позволяет эффективно управлять связанными электронными парами.

Энергия связи электронных пар достигает высоких значений в материалах с достаточно большой постоянной спин-орбитального взаимодействия Рашбы, которая, тем не менее, в настоящее время экспериментально достижима. Когда диэлектрическое экранирование минимально, энергия может достигать десятков миллиэлектронвольт и, в принципе, может быть увеличена напряжением на затворе. Высокая энергия связи электронных пар указывает на их стабильность и поднимает очень интересный вопрос о коллективном поведении таких пар и, вообще, о многочастичных эффектах, связанных с парным спин-орбитальным взаимодействием в твердых телах. Этот круг вопросов рассмотрен в следующей главе.

## Глава 4. Коррелированное электронное состояние с парным спин-орбитальным взаимодействием

В настоящей главе построена теория парного спин-орбитального взаимодействия в многоэлектронных одномерных системах, а также изучены его проявления в электронном транспорте. В качестве модельной системы рассматривается одномерный квантовый провод с расположенным вблизи него металлическим затвором. Парное спин-орбитальное взаимодействие порождается электрическим полем зарядов изображения на затворе.

Изучены как сильно коррелированное электронное состояние (латтинджерова жидкость), так и слабо взаимодействующий ферми-газ в рамках приближения случайных фаз. Вычислены важнейшие характеристики электронного состояния: спектр коллективных возбуждений, параметр их спин-зарядового разделения, динамические восприимчивости заряда, спиновой плотности, спинового тока, зарядовая жесткость, и так далее [168—170].

Парное спин-орбитальное взаимодействие приводит к еще более нетривиальному поведению в многоэлектронной задаче, в которой, помимо электронного спаривания, возникает новый сильный эффект. Речь идет о нестабильности однородной электронной системы по отношению к флуктуации плотности, которая тоже возникает при достаточно большой величине парного спин-орбитального взаимодействия, но развивается на большом пространственном масштабе. Ясно, что поведение многоэлектронной системы зависит от обоих эффектов, сравнительная роль которых в общем случае до конца не изучена. В этой главе мы сосредоточимся на случае одномерной электронной жидкости, для которой исследуем устойчивость основного состояния и коллективных возбуждений, а также проявления парного спин-орбитального взаимодействия в электронном транспорте [169; 170].

Неустойчивость обязана своим происхождением качественно новому, по сравнению с одночастичной рашбовской спин-орбитой, свойству парного спин-

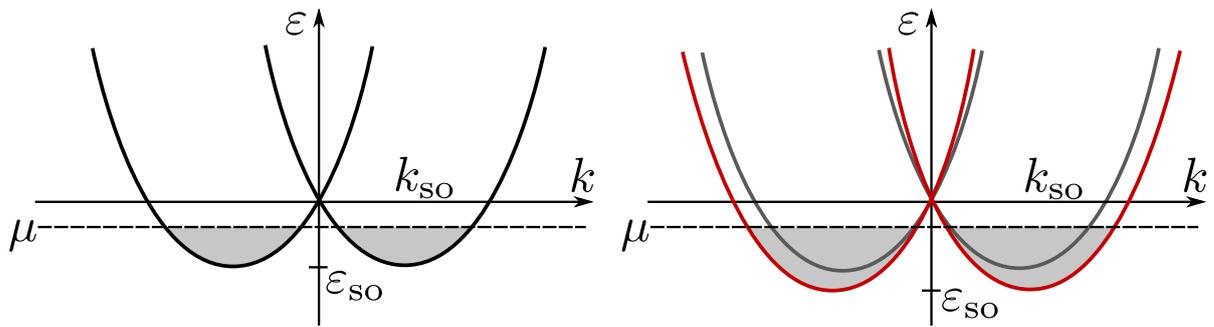


Рисунок 4.1 — Понижение дна зоны проводимости при увеличении электрического поля, порождающего спин-орбитальное взаимодействие. При фиксированном химическом потенциале в области с повышенным полем концентрация электронов повышается за счет их притока извне.

орбитального взаимодействия. Парное спин-орбитальное взаимодействие через величину кулоновских полей зависит от электронной плотности. Такая зависимость создает эффективный механизм роста флуктуаций электронной плотности, что при определенных условиях может привести к радикальной перестройке основного состояния.

Механизм неустойчивости заключается в следующем. Флуктуация электронной плотности увеличивает электрическое поле, порождающее спин-орбитальное взаимодействие. Это приводит к понижению дна зоны проводимости и, следовательно, энергии электронов в области флуктуации. В результате этого в область флуктуации возникает лавинообразный приток электронов из соседних областей или резервуаров. Таким образом возникшая флуктуация начинает расти. Этот механизм проиллюстрирован на Рисунке 4.1.

Вместе с тем, показано, что существует широкий диапазон величины парного спин-орбитального взаимодействия, от нуля до определенной критической, в котором электронная система является устойчивой, и детально исследовано, как с ростом этой величины меняются свойства системы вплоть до порога неустойчивости. Благодаря парной спин-орбите поведение системы в устойчивом режиме оказывается содержательно новым и нетривиальным. А именно, происходит драматическая трансформация спектра и спин-зарядовой структуры коллективных возбуждений. Краеугольным камнем латтинджеровой жидкости служит спин-зарядовое разделение, которое проявляется в существовании плазмонов и спинов [26; 73]. Парное

спин-орбитальное взаимодействие нарушает спин-зарядовое разделение между модами, в результате чего зарядовые и спиновые степени свободы оказываются в них перемешаны. Кроме того, парное спин-орбитальное взаимодействие приводит к сильному смягчению в длинноволновой области одной из коллективных мод, которая эволюционирует от чисто спинового возбуждения к чисто зарядовому, причем на пороге неустойчивости скорость моды обращается в ноль вместе с зарядовой жесткостью системы [168].

Возможностям наблюдения этих необычных коллективных мод в различных экспериментах посвящены последние разделы диссертации. Так, мы показали, что проявления парной спин-орбиты в спин-зарядовой структуре коллективных возбуждений и в перенормировке их скоростей можно идентифицировать по резонансам Фабри-Перо в частотной зависимости кондактанса квантового провода, соединенного с токоподводящими контактами. Замечательный факт состоит в том, что нарушение спин-зарядового разделения за счет парной спин-орбиты можно исследовать чисто электрическими методами [170].

#### **4.1 Неустойчивость основного состояния: среднеполевой подход**

Определим электронную плотность в одномодовом квантовом проводе, расположенном параллельно металлическому затвору, как показано на Рисунке 3.1, в случае фиксированного химического потенциала  $\mu$ . Для простоты рассмотрим эту задачу в рамках теории среднего поля, предполагая электронную плотность равномерно распределенной вдоль провода. Этот элементарный подход уже способен дать качественно верное понимание особенностей многоэлектронной системы с парным спин-орбитальным взаимодействием, как это видно из дальнейшего сравнения с более рафинированными методами, последовательно учитывающими обменно-корреляционное взаимодействие электронов.

В этом подходе энергия одночастичного состояния с волновым вектором  $k$  и спиновым индексом  $s$  равна

$$\varepsilon_{ks} = \frac{\hbar^2}{2m} [(k + s k_{so})^2 - k_{so}^2] + \mathfrak{v} n. \quad (4.1)$$

Энергия кулоновского взаимодействия есть  $\mathfrak{v} = \frac{2e^2}{\varepsilon} \ln(a/d)$ , а волновой вектор спин-орбитального взаимодействия равен  $k_{so} = \frac{\alpha m}{\hbar^2} F$ . Наш кунштштюк состоит в установлении связи между нормальным электрическим полем и электронной плотностью:

$$F = 2n \frac{e}{\varepsilon a}. \quad (4.2)$$

Уравнение (4.1) позволяет определить фермиевский волновой вектор:  $k_F^{(s)} = -s k_{so} \pm (k_{so}^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\mu - \mathfrak{v} n))^{\frac{1}{2}}$ . Замечая, что  $n = \sum_s \int \frac{dk}{2\pi}$ , мы приходим к уравнению, определяющему электронную плотность:

$$n = \frac{2}{\pi} \sqrt{\left(\frac{2\alpha m e}{\varepsilon \hbar^2 a}\right)^2 n^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\mu - \mathfrak{v} n)}. \quad (4.3)$$

Для дальнейшего окажется удобно ввести невозмущенную электронную плотность  $n_0 = \sqrt{8m\mu}/\pi\hbar$ , фермиевскую скорость  $v_F = \sqrt{2\mu/m}$ , а также безразмерную амплитуду спин-орбитального взаимодействия  $\alpha^* = \frac{4}{\pi} \frac{\tilde{\alpha}}{(a/a_B)}$ . Решение уравнения (4.3) имеет две ветви,

$$n_{\pm}(\alpha^*) = \frac{n_0}{1 - \alpha^{*2}} \left( -\frac{2\mathfrak{v}}{\pi\hbar v_F} \pm \sqrt{1 - \alpha^{*2} + \left(\frac{2\mathfrak{v}}{\pi\hbar v_F}\right)^2} \right), \quad (4.4)$$

что указывает на возможную бистабильность.

Рисунок 4.2 показывает, что в зависимости средней электронной плотности от величины парного спин-орбитального взаимодействия возникает S-образная неустойчивость. Решение единственно для достаточно слабого спин-орбитального взаимодействия  $\alpha^* < 1$ , но при  $1 < \alpha^* < \alpha_c^*$  у уравнения возникает второе решение. Значение  $\alpha^* \approx 1$ , соответствующее порогу неустойчивости с расходимостью электронной плотности, возникает при достаточно малом расстоянии между проводом и затвором  $a \approx a_B$ , при условии что константа спин-орбитального взаимодействия в материале  $\tilde{\alpha}$  порядка единицы. Критическое значение  $\alpha_c^*$  равно

$$\alpha_c^* = \sqrt{1 + (2\mathfrak{v}/\pi\hbar v_F)^2}. \quad (4.5)$$

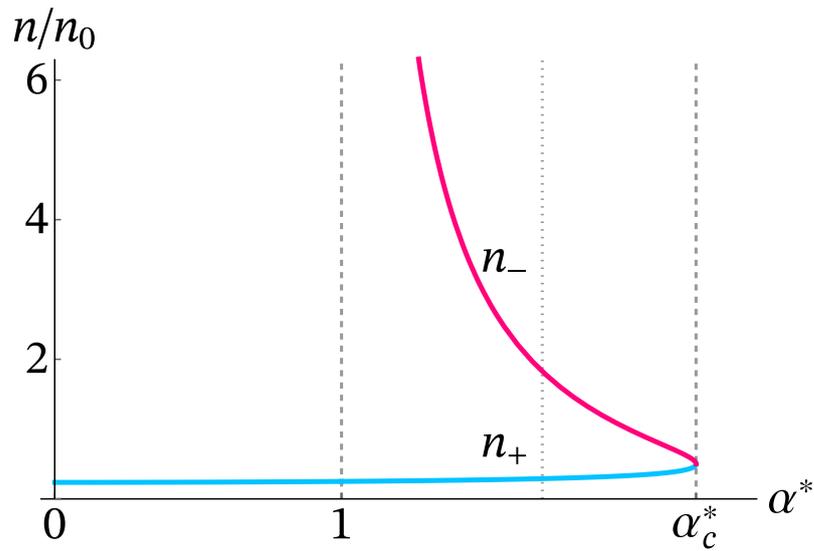


Рисунок 4.2 — Средняя электронная плотность в зависимости от амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия. Две ветви решения (4.4) показаны разным цветом. Величина кулоновского взаимодействия принята в расчетах равной  $\nu/\pi\hbar v_F =$

1.

При  $\alpha^* > \alpha_c^*$ , уравнение (4.3) и вовсе не имеет решений в рамках этой простой модели. Такое поведение  $n(\alpha^*)$  указывает на возможное формирование нового основного состояния при  $\alpha^* > \alpha_c^*$ , которое может оказаться пространственно неоднородным или обладать сильно коррелированной структурой, возникшей в результате парного спин-орбитального взаимодействия.

Стабилизировать неустойчивость могут механизмы, которые существенным образом меняют плотность состояния электронов и превращают систему из одномерной в квазиодномерную. Это, в первую очередь, подключение валентной зоны, а также подключение более высоких подзон поперечного квантования в квантовом проводе. Хорошим примером здесь служит пайерлсовская неустойчивость, которая не приводит в расщеплению одномерной электронной системы на масштабе  $2k_F$ , но отвечает за возникновение волн зарядовой плотности, если учесть квазиодномерность системы — взаимодействие с соседними одномерными нитями, которое и стабилизирует систему.

## 4.2 Коллективные возбуждения одномерной электронной жидкости с парным спин-орбитальным взаимодействием

Микроскопическая модель одномерной электронной системы с парным спин-орбитальным взаимодействием основана на вторично-квантованном гамильтониане  $H$ , который включает в себя парную спин-орбитальную часть  $H_{\text{PSOI}}$  из уравнения (3.19) и одночастичное рашбовское взаимодействие  $H_{\text{RSOI}}$  (3.20), наряду с кинетической энергией  $H_{\text{kin}}$  и оператором кулоновского электрон-электронного взаимодействия  $H_{e-e}$ :

$$H = H_{\text{kin}} + H_{e-e} + H_{\text{RSOI}} + H_{\text{PSOI}}, \quad (4.6a)$$

$$H_{\text{kin}} = \sum_s \int dx \psi_s^\dagger(x) \frac{p_x^2}{2m} \psi_s(x), \quad (4.6b)$$

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{s_1 s_2} \int \psi_{s_1}^\dagger(x_1) \psi_{s_2}^\dagger(x_2) U(x_1 - x_2) \psi_{s_2}(x_2) \psi_{s_1}(x_1) dx_1 dx_2, \quad (4.6b)$$

$$H_{\text{RSOI}} = \frac{\alpha}{\hbar} \sum_s \int dx \psi_s^\dagger(x) F p_x s \psi_s(x), \quad (4.6г)$$

$$H_{\text{PSOI}} = \frac{\alpha}{2\hbar} \sum_{s_1 s_2} \int \psi_{s_1}^\dagger(x_1) \psi_{s_2}^\dagger(x_2) [\hat{\delta}_{12}, E_n(x_1 - x_2)]_+ \psi_{s_2}(x_2) \psi_{s_1}(x_1) dx_1 dx_2, \quad (4.6д)$$

$$\hat{\delta}_{12} = (\hat{p}_{x_1} s_1 + \hat{p}_{x_2} s_2)/2, \quad (4.6е)$$

где кулоновское взаимодействие  $U(x)$  определено уравнением (3.17), нормальное поле зарядов изображения  $E_n(x)$  дается формулой (3.18), а порождающее одночастичную рашбовскую спин-орбиту поле  $F = E_n(0) + F_g - n_{\text{ion}} E_0$  складывается из поля собственного изображения электрона  $E_n(0)$ , полей заряженного затвора  $F_g$  и изображения положительного заряда фона  $-E_0 n_{\text{ion}}$  в проводе, где  $E_0$  есть нулевая гармоника фурье-преобразования поля  $E_n(r)$ , которое равно  $E_q = 2(e/\epsilon)|q|K_1(|q|a)$ . Фурье-преобразование кулоновского потенциала отталкивания равно  $U_q = 2(e^2/\epsilon)(K_0(qd) - K_0(qa))$ .

До настоящего времени в квантовых проводках изучался лишь эффект одночастичного спин-орбитального взаимодействия Рашбы [260–268], а парное спин-орбитальное взаимодействие полностью игнорировалось.

Ниже мы изучим линейный отклик системы с полным гамильтонианом (4.6) на внешнее возмущение вида  $H_{\text{ext}} = \sum_s \int dx \psi_s^\dagger(x) \varphi^{(s)}(x,t) \psi_s(x)$ . Эта модель решена двумя независимыми методами, а именно методом уравнений движения на квантовую функцию Вигнера в приближении случайных фаз и методом бозонизации. Оба подхода дают согласующиеся результаты. Вычисления производятся для одномерной системы длины  $L$  с фиксированной средней электронной плотностью  $n_0$ . Наложены периодические граничные условия, и рассматривается предел  $L \rightarrow \infty$ .

### 4.2.1 Приближение случайных фаз

Определим одночастичный и двухчастичный операторы Климонтовича [269]:

$$\hat{f}^{(s)}(x,p,t) = \frac{1}{2\pi} \int d\eta e^{ip\eta} \psi_s^\dagger(x + \frac{\eta}{2}, t) \psi_s(x - \frac{\eta}{2}, t) \quad (4.7)$$

и

$$\begin{aligned} \hat{f}^{(s_1, s_2)}(x_1, p_1, x_2, p_2, t) = \\ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\eta_1 d\eta_2 e^{i(p_1\eta_1 + p_2\eta_2)} \psi_{s_1}^\dagger(x_1 + \frac{\eta_1}{2}, t) \psi_{s_2}^\dagger(x_2 + \frac{\eta_2}{2}, t) \psi_{s_2}(x_2 - \frac{\eta_2}{2}, t) \psi_{s_1}(x_1 - \frac{\eta_1}{2}, t). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Средние значения  $f^{(s)}(x,p,t)$  и  $f^{(s_1, s_2)}(x_1, p_1, x_2, p_2, t)$  этих операторов на основном состоянии суть квантовые функции Вигнера, которые позволяют найти все интересующие нас наблюдаемые.

Вычислив коммутатор  $\hat{f}^{(s)}(x,p,t)$  с полным гамильтонианом  $H + H_{\text{ext}}$  и взяв среднее, мы приходим к уравнению движения на функцию Вигнера:

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t f^{(s)}(x,p,t) = & -\frac{i\hbar^2 p}{m}\partial_x f^{(s)}(x,p,t) + \frac{1}{2\pi} \int d\eta dp_1 e^{i(p-p_1)\eta} f^{(s)}(x,p_1,t) \left( \varphi_s(x - \frac{\eta}{2}, t) - \varphi_s(x + \frac{\eta}{2}, t) \right) \\
& + \frac{1}{2\pi} \sum_{\zeta} \int d\xi d\eta dp_1 dp_2 e^{i(p-p_1)\eta} f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) \left( U(x - \xi - \frac{\eta}{2}) - U(x - \xi + \frac{\eta}{2}) \right) \\
& - i\alpha s F \partial_x f^{(s)}(x,p,t) \\
& - \frac{i\alpha s}{2\pi} \int d\xi d\eta dp_1 dp_2 e^{i(p-p_1)\eta} f^{(s,-s)}(x,p_1,\xi,p_2,t) \left( E'_n(x - \xi - \frac{\eta}{2}) + E'_n(x - \xi + \frac{\eta}{2}) \right) \\
& - \frac{i\alpha}{2\pi} \sum_{\zeta} \int d\xi d\eta dp_1 dp_2 e^{i(p-p_1)\eta} \left( \frac{1}{2} \partial_{\xi} f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) + ip_2 f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) \right) E_n(x - \xi - \frac{\eta}{2}) \\
& - \frac{i\alpha}{2\pi} \sum_{\zeta} s \int d\xi d\eta dp_1 dp_2 e^{i(p-p_1)\eta} \left( \frac{1}{2} \partial_x f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) + ip_1 f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) \right) E_n(x - \xi - \frac{\eta}{2}) \\
& - \frac{i\alpha}{2\pi} \sum_{\zeta} \int d\xi d\eta dp_1 dp_2 e^{i(p-p_1)\eta} \left( \frac{1}{2} \partial_{\xi} f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) - ip_2 f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) \right) E_n(x - \xi + \frac{\eta}{2}) \\
& - \frac{i\alpha}{2\pi} \sum_{\zeta} s \int d\xi d\eta dp_1 dp_2 e^{i(p-p_1)\eta} \left( \frac{1}{2} \partial_x f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) - ip_1 f^{(s,\zeta)}(x,p_1,\xi,p_2,t) \right) E_n(x - \xi + \frac{\eta}{2}).
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Это первое уравнение в цепочке Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона (ББГКИ) [270]. Мы решим его в приближении случайных фаз, которое отвечает факторизации двухчастичной функции Вигнера [66],

$$f^{(s_1, s_2)}(x_1, p_1, x_2, p_2, t) = f^{(s_1)}(x_1, p_1, t) f^{(s_2)}(x_2, p_2, t). \tag{4.10}$$

Такое расщепление цепочки ББГКИ, в конечном счете, и определяет учет корреляций в задаче. Введем отклонение  $f_1^{(s)}(x,p,t)$  величины  $f^{(s)}(x,p,t)$  от ее равновесного значения  $f_0^{(s)}(p)$  в результате воздействия внешнего возмущения  $H_{\text{ext}}$ ,

$$f_1^{(s)}(x,p,t) = f^{(s)}(x,p,t) - f_0^{(s)}(p). \tag{4.11}$$

Уравнение движения на  $f_1^{(s)}(x,p,t)$ , линеаризованное по  $H_{\text{ext}}$ , в фурье-представлении имеет вид:

$$-\hbar\omega f_1^{(s)}(q,p,\omega) = -\frac{\hbar^2 pq}{m} f_1^{(s)}(q,p,\omega) \quad (4.12a)$$

$$+ \varphi_{q\omega}^{(s)} \left[ f_0^{(s)}\left(p + \frac{q}{2}\right) - f_0^{(s)}\left(p - \frac{q}{2}\right) \right] \quad (4.12б)$$

$$+ U_q \left[ f_0^{(s)}\left(p + \frac{q}{2}\right) - f_0^{(s)}\left(p - \frac{q}{2}\right) \right] \sum_{\zeta} n_{q\omega}^{(\zeta)} \quad (4.12в)$$

$$- \alpha qs F_{\text{mean}} f_1^{(s)}(q,p,\omega) \quad (4.12г)$$

$$+ \alpha s E_q p \left[ f_0^{(s)}\left(p + \frac{q}{2}\right) - f_0^{(s)}\left(p - \frac{q}{2}\right) \right] \sum_{\zeta} n_{q\omega}^{(\zeta)} \quad (4.12д)$$

$$- \frac{m\alpha}{e\hbar} E_q \left[ f_0^{(s)}\left(p + \frac{q}{2}\right) - f_0^{(s)}\left(p - \frac{q}{2}\right) \right] \sum_{\zeta} \zeta j_{q\omega}^{(\zeta)}, \quad (4.12е)$$

где введены отклик электронной плотности

$$n_{q\omega}^{(s)} = \int f_1^{(s)}(q,p,\omega) dp \quad (4.13)$$

и первый момент функции Вигнера

$$j_{q\omega}^{(s)} = -\frac{e\hbar}{m} \int p f_1^{(s)}(q,p,\omega) dp. \quad (4.14)$$

Слагаемые (4.12a)–(4.12в) описывают вклад кинетической энергии, внешнего потенциала и кулоновского электрон-электронного отталкивания.

Слагаемое (4.12г) описывает одночастичное спин-орбитальное взаимодействие Рашбы, порождающееся однородным (“средним”) электрическим полем  $F_{\text{mean}} = E_n(0) + F_g - (n_0 - n_{\text{ion}})E_0$ , которое, по сравнению с полем  $F$ , дополнительно содержит вклад от изображения на затворе средней электронной плотности  $n_0$ . Остановимся на эффекте одночастичного спин-орбитального взаимодействия подробнее.

Приближение случайных фаз является пертурбативным подходом. Среднее значение  $f_0^{(s)}(p)$  вычисляется в нем на основном состоянии одночастичного гамильтониана, который включает в себя и одночастичную спин-орбиту Рашбы. Для системы с фиксированным числом частиц это задает фермиевский импульс для каждой проекции спина:  $k_F^{(s)} = -sk_{\text{so}} \pm k_F$ , где  $k_{\text{so}} = \alpha m F_{\text{mean}} / \hbar^2$  и  $k_F = \pi n_0 / 2$ . Ограничившись в уравнении движения лишь слагаемыми (4.12a)–(4.12г), мы легко найдем

электронную плотность в случае, когда спин-орбитальное взаимодействие порождается одним только однородным полем. Для этого выразим из уравнения  $f_1^{(s)}(x, p, t)$  и проинтегрируем по  $p$ , чтобы получить уравнение на плотность,

$$n_{q\omega}^{(s)} = \varphi_{q\omega}^{(s)} \chi_{q\omega} + U_q \chi_{q\omega} \sum_{\zeta} n_{q\omega}^{(\zeta)}. \quad (4.15)$$

Здесь введена линдхардтовская восприимчивость

$$\begin{aligned} \chi_{q\omega} &= \int d\kappa \frac{f_0^{(s)}(\kappa + \frac{q}{2}) - f_0^{(s)}(\kappa - \frac{q}{2})}{-\hbar(\omega + i0) + \frac{\hbar^2 \kappa q}{m} + \alpha q s F_{\text{mean}}} \\ &= \frac{m}{2\pi \hbar^2 q} \ln \frac{(q - 2k_F)^2 - \left(\frac{2m\omega + i0}{\hbar q}\right)^2}{(q + 2k_F)^2 - \left(\frac{2m\omega + i0}{\hbar q}\right)^2}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

которая не зависит от спиновой проекции  $s$  и среднего поля  $F_{\text{mean}}$ . Следовательно, коллективные возбуждения, закон дисперсии которых

$$\chi_{q\omega}^{-1} [\chi_{q\omega}^{-1} - 2U_q] = 0 \quad (4.17)$$

получается обращением в ноль детерминанта системы, составленной из уравнений (4.15) при  $s = \pm 1$ , суть обычные плазмоны и спиноны, между которыми соблюдается спин-зарядовое разделение. Важно, что их скорости не зависят от величины парного спин-орбитального взаимодействия.

Напротив, слагаемые (4.12д) и (4.12е) отражают именно вклад парного спин-орбитального взаимодействия в коллективное движение электронов. В то время как структура члена (4.12д) аналогична кулоновскому отталкиванию (4.12в), но с амплитудой, зависящей от спина, здесь также возникает качественно новый вклад (4.12е).

Чтобы вывести замкнутую систему уравнений на  $n_{q\omega}^{(s)}$ , сначала проинтегрируем уравнение (4.12) по  $p$ :

$$\omega e n_{q\omega}^{(s)} + q j_{q\omega}^{(s)} = \frac{\alpha q s e}{2\hbar} \left[ 2F_{\text{mean}} n_{q\omega}^{(s)} + E_q n_0 \sum_{\zeta} n_{q\omega}^{(\zeta)} \right]. \quad (4.18)$$

Подставим взятое отсюда выражение для  $j_{q\omega}^{(s)}$  в (4.12). Выразим из получившегося уравнения  $f_1^{(s)}(q, p, \omega)$  и проинтегрируем его по  $p$ . Тогда мы придем к системе,

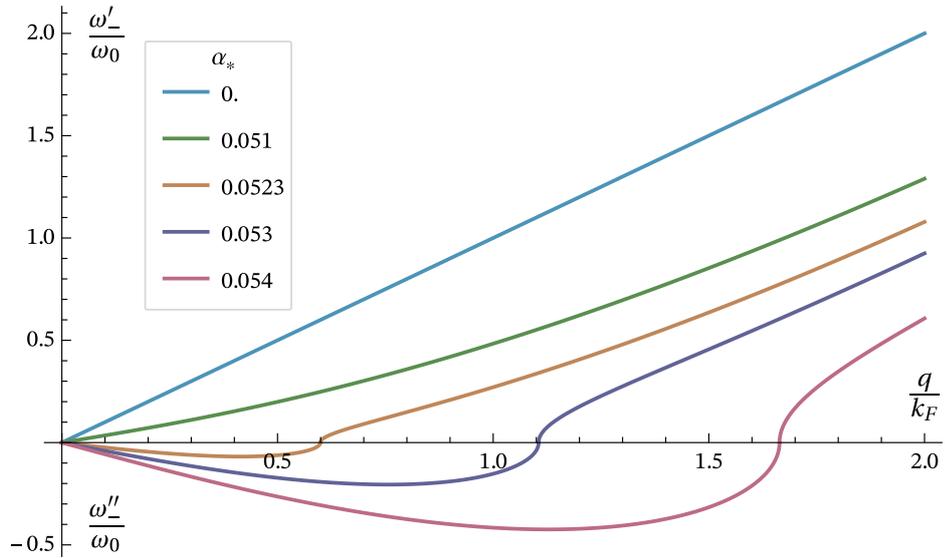


Рисунок 4.3 — Действительная ( $\omega'_-$ ) и мнимая ( $\omega''_-$ ) части частоты коллективных возбуждений в зависимости от волнового вектора для нескольких значений амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия. Частота нормализована на  $\omega_0 = v_F k_F$ .

в которой зацеплены неизвестные величины  $n_{q\omega}^{(s)}$  при  $s = \pm 1$ :

$$n_{q\omega}^{(s)} \left( \chi_{q\omega}^{-1} - U_q + \frac{m\alpha^2 E_q}{\hbar^2} (2F_{\text{mean}} + n_0 E_q) - s \omega \frac{2m\alpha E_q}{\hbar q} \right) + n_{q\omega}^{(-s)} \left( -U_q + \frac{m\alpha^2 E_q}{\hbar^2} (2F_{\text{mean}} + n_0 E_q) \right) = \varphi_{q\omega}^{(s)}. \quad (4.19)$$

Обращая в ноль ее детерминант, мы получим закон дисперсии коллективных возбуждений в системе. Чтобы упростить его запись, введем еще несколько новых безразмерных переменных, а именно:  $\mathcal{U}_q = \frac{U_q}{\pi \hbar v_F}$ ,  $\mathcal{F} = \frac{F_{\text{mean}}}{en_0^2}$ ,  $\mathcal{E}_q = \frac{E_q}{en_0}$ , а также  $\alpha_* = \frac{\tilde{\alpha}}{\pi r_s}$ , где параметр неидеальности одномерной электронной жидкости есть  $r_s = (2n_0 a_B)^{-1}$ . Заодно введем обезразмеренную фазовую скорость моды  $v_q = \frac{\omega}{v_F q}$ , где фермиевская скорость равна  $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$ .

Тогда

$$\left( \frac{\omega_{\pm}}{qv_F} \right)^2 = 1 + (\mathcal{U}_q - \alpha_*^2 \mathcal{F} \mathcal{E}_q) \pm \sqrt{(\mathcal{U}_q - \alpha_*^2 \mathcal{F} \mathcal{E}_q)^2 + \alpha_*^2 \mathcal{E}_q^2}. \quad (4.20)$$

Основной интерес представляет поведение моды  $\omega_-$  при увеличении  $\alpha_*$ . Оно показано на Рисунке 4.3 для случая квантового провода, расположенного достаточно близко к затвору ( $a = 0.4a_B$ ,  $d = 0.08a_B$ , and  $r_s = 0.6$ ). При увеличении парного спин-орбитального взаимодействия мода смягчается, причем ее скорость обращается

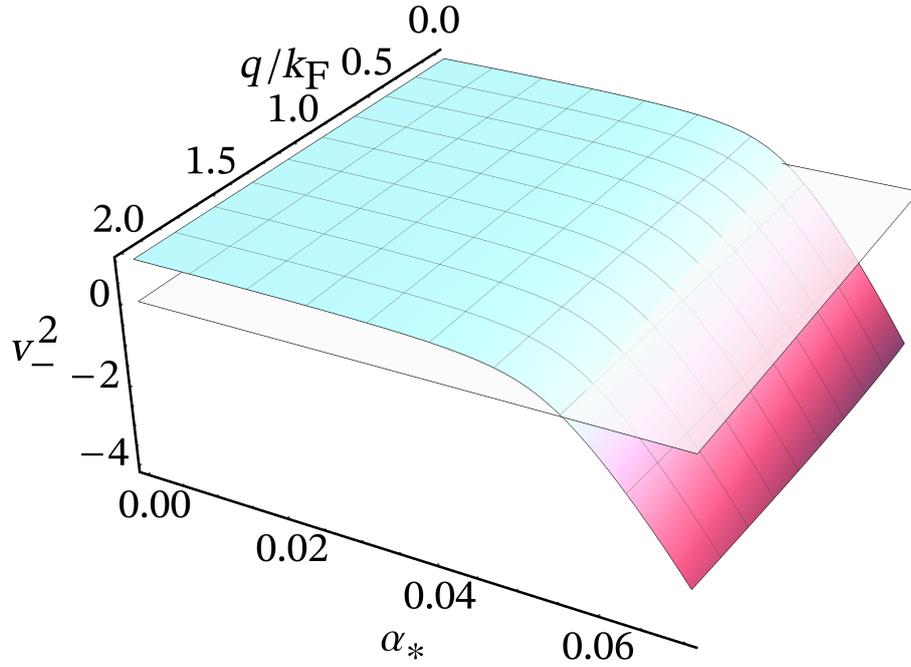


Рисунок 4.4 — Квадрат безразмерной фазовой скорости  $v_-^2$  коллективного возбуждения как функция волнового вектора и величины парного спин-орбитального взаимодействия. Дополнительно показана плоскость  $v_-^2 = 0$ . Параметры системы те же, что и на Рисунке 4.3.

в нуль при критическом значении амплитуды

$$\alpha_c(q) = \frac{\sqrt{1 + 2\mathcal{U}_q}}{\sqrt{\mathcal{E}_q^2 + 2\mathcal{F}\mathcal{E}_q}}. \quad (4.21)$$

При  $\alpha_* > \alpha_c(q)$  частота моды становится мнимой, то есть приобретает положительный инкремент. Это означает, что коллективные возбуждения теряют устойчивость. Важно отметить, что при увеличении  $\alpha_*$  устойчивость теряется сначала в длинноволновой области, где инкремент, вдобавок, имеет максимум как функция  $q$ .

Зависимость квадрата безразмерной фазовой скорости  $v_-^2$  от обеих переменных  $q$  и  $\alpha_*$  показана на Рисунке 4.4. Квадрат скорости обращается в нуль при  $\alpha_* = \alpha_c(q)$  и оказывается отрицательным в области  $\alpha_* > \alpha_c(q)$ , где мода становится неустойчивой.

Напротив, частота моды  $\omega_+$  всегда остается действительной при увеличении  $\alpha_*$ , а фазовая скорость моды  $v_+$  с ростом парного спин-орбитального взаимодействия выходит на насыщение при  $\mathcal{F} \neq 0$ . Поведение частоты моды  $\omega_+$  при увеличении  $\alpha_*$

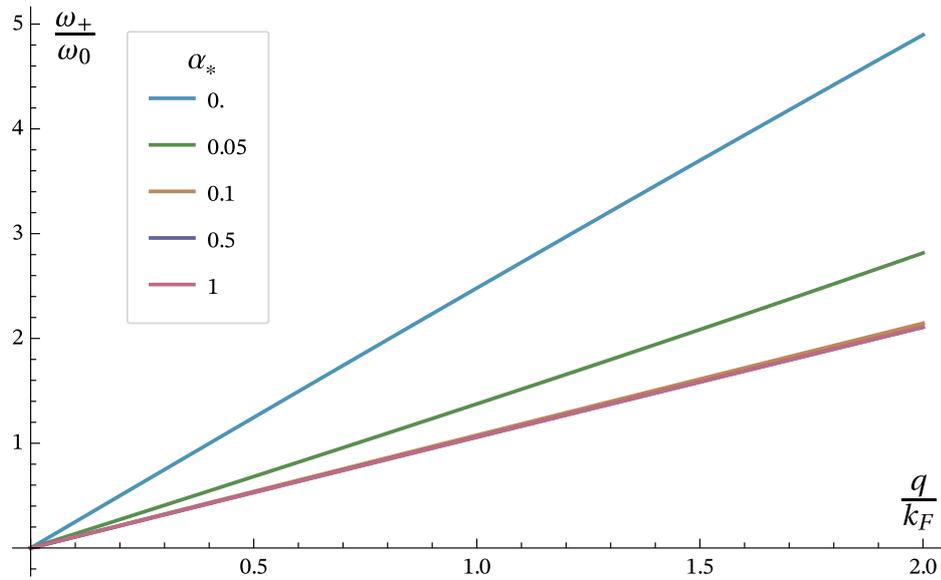


Рисунок 4.5 — Частота ветви  $\omega_+$  коллективных возбуждений в зависимости от волнового вектора для нескольких значений амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия. Частота нормализована на  $\omega_0 = v_F k_F$ . Параметры системы те же, что и на Рисунке 4.3.

показано на Рисунке 4.5. Зависимость квадрата безразмерной фазовой скорости  $v_+^2$  от обеих переменных  $q$  и  $\alpha_*$  показана на Рисунке 4.6.

В отсутствие парного спин-орбитального взаимодействия, ветви коллективных возбуждений  $\omega_+$  и  $\omega_-$  отвечают, соответственно, чисто зарядовым возбуждениям (плазмонам) и чисто спиновым возбуждениям (спинонам).

Соблюдение между ними спин-зарядового разделения — это одно из ключевых свойств латтинджеровой жидкости [26; 28; 73]. При наличии одночастичного рашбовского спин-орбитального взаимодействия, спин-зарядовое разделение соблюдается в чисто одномерных системах. Однако, парное спин-орбитальное взаимодействие нарушает спин-зарядовое разделение в одномодовых квантовых проводах, что приводит к формированию новых коллективных возбуждений, зарядовые и спиновые степени свободы которых оказываются перемешаны [168—170].

Количественной характеристикой спин-зарядовой структуры моды служит параметр спин-зарядового разделения  $\xi$ , который определяется независимо для каждой из мод по относительному весу плотностей электронов со спином вверх и вниз.

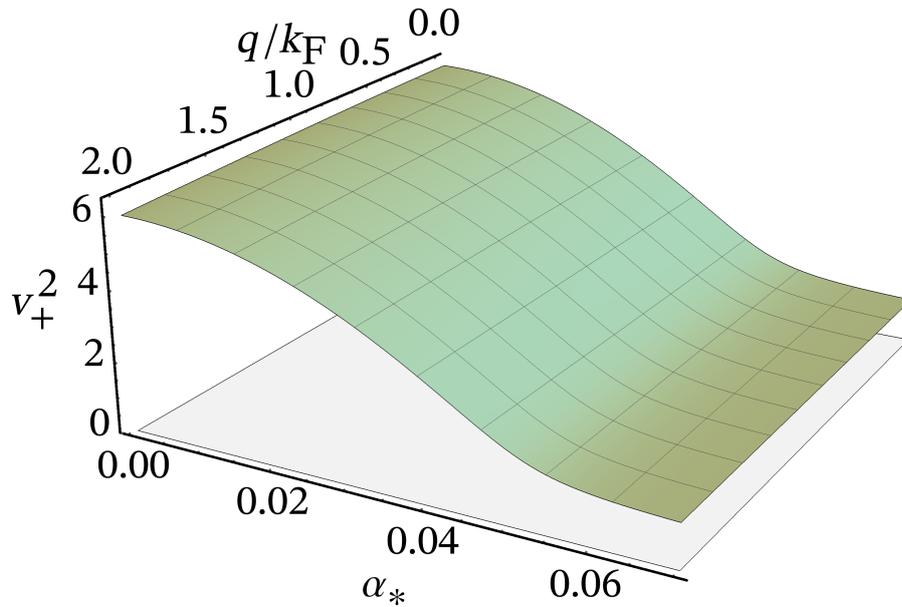


Рисунок 4.6 — Квадрат безразмерной фазовой скорости  $v_+^2$  коллективного возбуждения как функция волнового вектора и величины парного спин-орбитального взаимодействия. Дополнительно показана плоскость  $v_+^2 = 0$ . Параметры системы те же, что и на Рисунке 4.3.

В силу уравнения (4.19), он напрямую выражается через фазовые скорости мод:

$$\xi_{\pm} = \frac{n_{q\omega}^+ + n_{q\omega}^-}{n_{q\omega}^+ - n_{q\omega}^-} \Big|_{\omega_{\pm}} = \frac{v_{\pm} - v_{\pm}^{-1}}{\alpha_* \mathcal{E}_q}. \quad (4.22)$$

При  $\alpha_* = 0$  параметр спин-зарядового разделения  $\xi_- = 0$ , что означает, что мода  $\omega_-$  отвечает чисто спиновому возбуждению ( $n_{\uparrow} = -n_{\downarrow}$ ), причем ее скорость не перенормируется кулоновским взаимодействием:  $\omega_- = v_F q$ . При  $\alpha_* \rightarrow \alpha_c(q)$ , скорость моды обращается в ноль,  $v_-(q) \rightarrow 0$ , а параметр спин-зарядового разделения, соответственно, расходится,  $\xi_- \rightarrow \infty$ . Следовательно, на пороге неустойчивости  $\alpha_* = \alpha_c(q)$  коллективная мода  $\omega_-$  превращается в чистый плазмон ( $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$ ). Изменение спин-зарядовой структуры моды при увеличении  $\alpha_*$  показано на Рисунке 4.7.

Важное свойство рассматриваемой системы состоит в том, что при наличии парного спин-орбитального взаимодействия ( $\mathcal{E}_q \neq 0$ ) как скоростью коллективных мод  $v_{\pm}$ , так и их спин-зарядовым разделением  $\xi_{\pm}$  можно управлять посредством величины электрического поля  $\mathcal{F}$ , изменяя напряжение на затворе. Так,  $v_-$  обращается в ноль при увеличении  $\mathcal{F}$ , то есть соответствующая мода смягчается. Возможность управления скоростью плазмонов за счет изменения величины спин-орбитального

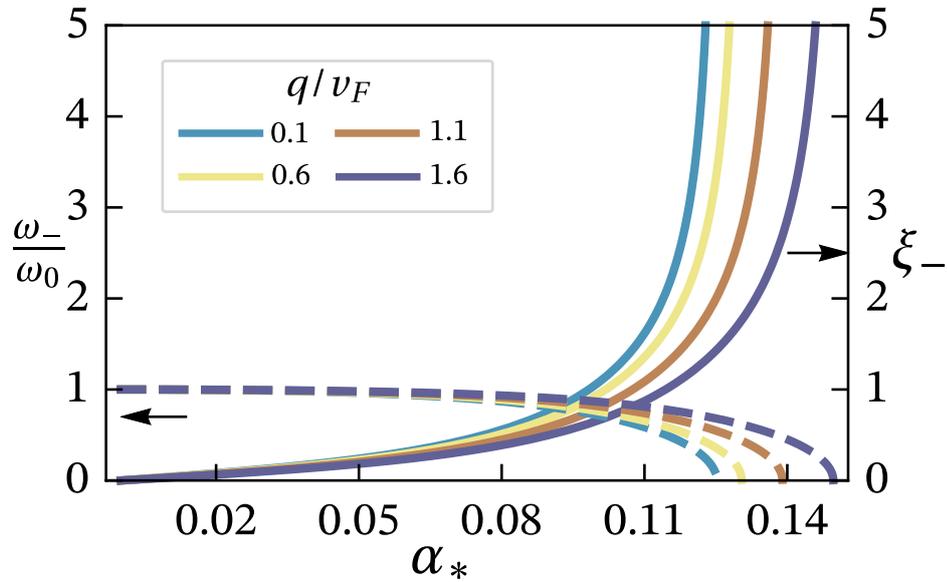


Рисунок 4.7 — Параметр спин-зарядового разделения (сплошная линия) и нормализованная фазовая скорость (штриховая линия) для ветви  $\omega_-$  коллективных возбуждений в зависимости от величины парного спин-орбитального взаимодействия. Параметры системы те же, что и на Рисунке 4.3.

взаимодействия обсуждалась для двумерных систем [271]. Принципиальное отличие рассматриваемой ситуации от двумерного случая заключается в том, что в отсутствие парной спин-орбиты величина поля  $\mathcal{F}$  в одномерной системе не влияет на скорости коллективных возбуждений, между которыми продолжает соблюдаться спин-зарядовое разделение. Это объясняется тем, что одночастичное спин-орбитальное взаимодействие можно в одномерном случае полностью устранить унитарным преобразованием [267].

Зарядовая жесткость системы  $\kappa = -\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{nn}^{-1}(q, 0)$ , определенная через зарядовую восприимчивость  $\chi_{nn}(q, \omega) = (n_{q\omega}^+ + n_{q\omega}^-) / \varphi_{q\omega}$ , полученную из уравнения (4.19), равна

$$\kappa = \pi \hbar v_F (1 + 2\mathcal{U}_0) \left( 1 - \frac{\alpha_*^2}{\alpha_c^2(0)} \right). \quad (4.23)$$

Зарядовая жесткость обращается в ноль при  $\alpha_* = \alpha_c(0)$ , что указывает на нестабильность в зарядовом секторе. Напротив, жесткость спинового сектора не обращается в ноль и остается конечной при любой величине парного спин-орбитального взаимодействия.

Сравним критические значения амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия  $\alpha_c(0)$  из уравнения (4.21), при котором начинают терять устойчивость длинноволновые коллективные возбуждения, с величиной  $\alpha_c^*$  из уравнения (4.5), отвечающей порогу неустойчивости основного состояния системы с фиксированным химическим потенциалом. В случае, когда система находится достаточно близко к затвору,  $n_0 a \ll 1$ , имеет место соотношение  $\alpha_c(0) \propto \sqrt{n_0 a} \alpha_c^*$ , что означает, что первой развивается неустойчивость коллективных возбуждений. В противоположном предельном случае  $n_0 a \gg 1$ , они одного порядка величины.

### 4.2.2 Метод бозонизации

В этом разделе мы представим подход к проблеме коллективных возбуждений латтинджеровой жидкости с парным спин-орбитальным взаимодействием, основанный на бозонизации [69]. Изложение резко упрощается в случае, когда в системе отсутствует среднее электрическое поле, что отвечает электронейтральной системе вблизи незаряженного затвора. Тогда в качестве базиса при построении бозонизации можно выбрать собственные состояния оператора кинетической энергии, как это проделано в Приложении А для бесспиновых электронов. В интересующем нас сейчас случае электронов со спином бозонизация строится аналогично, но для наших целей оказывается удобным переопределить бозонные фазы так, что полевой оператор  $r$ -фермиона принимает вид

$$\Psi_{rs}(x) = \frac{F_{rs}}{\sqrt{2\pi\epsilon}} e^{ir(k_F - \frac{\pi}{L})x} e^{ir\frac{2\pi}{L}N_{rs}x} e^{i\phi_{rs}(x)}, \quad (4.24)$$

где  $s$  есть спиновый индекс, а бозонная фаза  $\phi_{rs}$  выражается через нормально упорядоченную  $r$ -фермионную плотность  $\rho_{rs}(q)$  как

$$\phi_{rs} = \frac{2\pi ir}{L} \sum_{q \neq 0} \frac{e^{-iqx}}{q} \rho_{rs}(q). \quad (4.25)$$

Плотность  $r$ -фермионов равна

$$\rho_{rs}(x) = \frac{k_F}{2\pi} + \frac{r}{2\pi} \partial_x \phi_{rs}, \quad (4.26)$$

а операторы кинетической энергии и кулоновского взаимодействия принимают вид

$$H_{\text{kin}} = \frac{\hbar v_F}{4\pi} \sum_{rs} \int : (\partial_x \phi_{rs})^2 : dx, \quad (4.27)$$

$$H_{e-e} = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{\substack{r_1 r_2 \\ s_1 s_2}} r_1 r_2 \int U(x_1 - x_2) : \partial_{x_1} \phi_{r_1 s_1} \partial_{x_2} \phi_{r_2 s_2} : dx_1 dx_2. \quad (4.28)$$

Для того, чтобы построить бозонизованное представление гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия, преобразуем уравнение (3.19) к виду

$$H_{\text{PSOI}} = -\frac{m\alpha}{e\hbar} \int dx_1 dx_2 E_n(x_1 - x_2) \rho(x) j_\sigma(x), \quad (4.29)$$

где  $\rho(x) = \sum_{rs} \rho_{rs}(x)$  есть плотность электронов, и обозначено  $j_\sigma(x) = \sum_s s j^{(s)}(x)$ , причем

$$j^{(s)}(x) = -\frac{ie\hbar}{2m} \sum_r [\partial_x \psi_{rs}^+ \psi_{rs}(x) - \psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}] . \quad (4.30)$$

При бозонизации  $j_\sigma(x)$  возникает проблема, связанная с тем, что в фигурирующем там произведении  $\psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x)$  операторы взяты в одной точке пространства. Такое произведение плохо определено в модели Латтинджера и, следовательно, оператор  $j_\sigma(x)$  нуждается в регуляризации. Это довольно типичная проблема квантовой теории поля с плохим континуальным пределом. Для ее решения существует несколько подходов, которые включают, среди прочего, и метод нормального упорядочения, которым мы воспользовались в Приложении А. В данном случае удобнее оказывается другой подход, основанный на регуляризации путем расщепления произведения в точке (point-splitting regularization) [272]. В техническом отношении, он состоит в вычислении произведения этих операторов в близких, но не совпадающих точках,  $\psi_{rs}^+(x+a) \partial_x \psi_{rs}(x)$  и разложении получившегося выражения в степенной ряд по  $a$ . Параметр расщепления  $a$  затем устремляется к нулю, а возникающие при вычислении предела сингулярные члены, содержащие отрицательные степени  $a$ , вычитаются из ответа.

Действуя таким образом, мы приходим к регуляризованному выражению

$$: \psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) : = A \frac{\partial \phi_{rs}}{\partial x} + B : \left( \frac{\partial \phi_{rs}}{\partial x} \right)^2 : + C \frac{\partial^2 \phi_{rs}}{\partial x^2}, \quad (4.31)$$

амплитуды  $A$ ,  $B$  и  $C$  в котором зависят как от параметра расщепления  $a$ , так и от ультрафиолетового параметра обрезания  $\epsilon$  теории. Эти амплитуды не могут быть определены в рамках феноменологической латтинджеровой модели, и требуют для своего нахождения референсного микроскопического подхода. Мы определим их из условия правильного предельного перехода к невзаимодействующим электронам. Для этой цели мы вычислим коррелятор

$$\langle : \psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) : \rho_{rs}(y) \rangle = B \frac{k_F^3}{2\pi} - A \frac{r}{2\pi} \frac{1}{(x-y)^2} + C \frac{r}{\pi} \frac{1}{(x-y)^3}, \quad (4.32)$$

использував предыдущее бозонизованное выражение для  $: \psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) :$ , и пренебрегая в гамильтониане всеми взаимодействиями. Тот же самый коррелятор, рассчитанный для свободных  $r$ -фермионов с помощью обыкновенного вторичного квантования, равен

$$\langle : \psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) : \rho_{rs}(y) \rangle = \frac{irk_F^3}{8\pi^2} - \frac{irk_F}{4\pi^2} \frac{1}{(x-y)^2} + \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(x-y)^3}. \quad (4.33)$$

Сравнение этих выражений позволяет определить коэффициенты в формуле (4.31), так что окончательно мы получаем

$$: \psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) : = \frac{ik_F}{2\pi} \frac{\partial \phi_{rs}}{\partial x} + \frac{ir}{4\pi} : \left( \frac{\partial \phi_{rs}}{\partial x} \right)^2 : + \frac{r}{4\pi} \frac{\partial^2 \phi_{rs}}{\partial x^2}. \quad (4.34)$$

Стоит отметить, что, к сожалению, до сих пор в литературе использовалось ошибочное выражение  $\psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) = (ir/4\pi)[\partial_x \phi_{rs}]^2$ , см., например, работу [261], формула (6). Легко видеть, что тогда  $\psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) + h.c. = 0$ , в то время как должно быть  $\psi_{rs}^+(x) \partial_x \psi_{rs}(x) + h.c. = \partial_x \rho_{rs}$ . Использование неправильного выражения, в котором отсутствуют первый и третий члены в правой части уравнения (4.34), делает невозможным получение корректного гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия.

Из уравнения (4.34) следует, что

$$j^{(s)}(x) = \frac{ie\hbar}{2m} \sum_r \left[ \frac{ik_F}{\pi} \frac{\partial \phi_{rs}}{\partial x} + \frac{ir}{2\pi} : \left( \frac{\partial \phi_{rs}}{\partial x} \right)^2 : \right]. \quad (4.35)$$

Квадратичная часть гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия (4.29) принимает вид

$$H_{\text{PSOI}} = \frac{\alpha k_F}{4\pi^2} \sum_{\substack{r_1 r_2 \\ s_1 s_2}} r_1 s_2 \int dx_1 dx_2 E_n(x_1 - x_2) : \partial_{x_1} \phi_{r_1 s_1} \partial_{x_2} \phi_{r_2 s_2} : . \quad (4.36)$$

Переходя от фазы  $\phi_{rs}$  к бозе-операторам  $a_s^+(q) = \left(\frac{2\pi}{L|q|}\right)^{1/2} \sum_{r=\pm} \theta(rq) \rho_{rs}(q)$ , запишем бозонизованное представление полного гамильтониана (4.6):

$$\begin{aligned} H = & \frac{\hbar v_F}{2} \sum_{\substack{q>0 \\ r,s=\pm}} q [a_s^+(rq) a_s(rq) (2 + \mathcal{U}_q + rs\alpha_* \mathcal{E}_q) \\ & + \frac{1}{2} [a_s^+(rq) a_{-s}^+(-rq) + h.c.] (\mathcal{U}_q + rs\alpha_* \mathcal{E}_q) \\ & + \frac{1}{2} [a_s^+(rq) a_s^+(-rq) + a_s^+(rq) a_{-s}(rq) + h.c.] \mathcal{U}_q] . \end{aligned} \quad (4.37)$$

Диагонализуем его преобразованием Боголюбова-Тябликова [273; 274]. Для этой цели найдем матрицы, определяющие коммутаторы  $[H, a_k^+] = \sum_i a_i^+ A_{ik} + a_i B_{ik}$  для каждого бозе-оператора  $a_k$  из уравнения (4.37). Тогда собственные значения матрицы  $(A - B)(A + B)$  в точности дают квадраты частот элементарных возбуждений, которые, как показано в Приложении Г, равны

$$\left(\frac{\omega_{\pm}}{qv_F}\right)^2 = 1 + \mathcal{U}_q \pm \sqrt{\mathcal{U}_q^2 + \alpha_*^2 \mathcal{E}_q^2}, \quad (4.38)$$

что совпадает с уравнением (4.20) при  $\mathcal{F} = 0$ .

В заключение этого раздела, мы рассмотрели одномерную электронную систему с парным спин-орбитальным взаимодействием, порожденным электрическим полем зарядов изображения. Мы показали, что в одномерной системе с фиксированным химическим потенциалом увеличение спин-орбитального взаимодействия приводит к возникновению двух ветвей решения для величины средней электронной плотности, на одной из которых решение неустойчиво и расходится при значениях константы спин-орбитального взаимодействия, вполне достижимых экспериментально. Неустойчивость отражает существование положительной обратной связи между плотностью электронов и величиной парного спин-орбитального взаимодействия, которая создает механизм роста флуктуации электронной плотности, и указывает на тенденцию к формированию нового коррелированного состояния.

В одномерной электронной жидкости парное спин-орбитальное взаимодействие вносит прежде неучтенный вклад в гамильтониан электрон-электронного взаимодействия и драматически перестраивает межэлектронные корреляции. По мере увеличения парного спин-орбитального взаимодействия в системе нарушается спин-зарядовое разделение между коллективными возбуждениями, которые приобретают смешанную спин-зарядовую структуру. При этом одна из двух коллективных мод эволюционирует от чисто спинового, в невзаимодействующем случае, к чисто зарядовому возбуждению, а ее скорость непрерывно уменьшается. Иными словами, мода в длинноволновой части спектра системы смягчается. При критическом значении амплитуды парного спин-орбитального взаимодействия скорость этой моды обращается в ноль вместе с зарядовой жесткостью системы.

### **4.3 Динамика одномерной электронной системы с нарушенным спин-зарядовым разделением**

В этом разделе мы подробнее остановимся на спин-зарядовом разделении, которое является одним из ключевых свойств латтинджеровой жидкости [26; 28; 73]. Спин-зарядовое разделение подробно изучалось в системах без спин-орбитального взаимодействия. При наличии одночастичного рашбовского взаимодействия, спин-зарядовое разделение соблюдается в чисто одномерных системах. Однако, в реалистичных квази-одномерных структурах с подзонами поперечного квантования спин-зарядовое разделение нарушается, поскольку спин не является в них хорошим квантовым числом, что приводит к образованию новых коллективных мод, в которых спиновая и зарядовая степени свободы перемешаны [261].

В одномерных электронных системах с парным спин-орбитальным взаимодействием возникают еще более интересные эффекты, поскольку нарушению спин-зарядового разделения сопутствует еще и неустойчивость системы при достаточно сильном взаимодействии [168].

Спин-зарядовое разделение может также нарушаться в одномерных краевых состояниях двумерных топологических изоляторов. Такие состояния, как известно, имеют геликоидальную структуру, в которой спин жестко связан с импульсом электрона. В наиболее простом и изученном случае  $S_z$  симметрии, когда ориентация спина зависит только от направления импульса, а не от его величины, спин-зарядовое разделение имеет место [275]. Однако  $S_z$  симметрия не является внутренне присущим свойством топологического изолятора. В общем случае она нарушается за счет спин-орбитального взаимодействия [257; 276—278]. При этом одночастичные состояния моделируются как крамерсова пара одномерных состояний со спином, ориентация которого зависит от величины импульса, а не только от его направления [279; 280]. Пакет, составленный из таких состояний, не имеет определенного спина и, что особенно интересно, электрон-электронное взаимодействие приобретает эффективную зависимость от спина, как видно из необычной формы симметричного относительно обращения времени гамильтониана взаимодействия между электронами (см. уравнение (6) в [279]).

Аналогичная ситуация возникает в системах с квантовым эффектом Холла при факторе заполнения 2, где измерения динамического кондактанса в зависимости от частоты обнаруживают перемешивание зарядовых и нейтральных (спиновых) коллективных мод в одномерных киральных краевых состояниях [281].

Таким образом, возникает достаточно общая проблема идентификации нарушения спин-зарядового разделения во многих одномерных и квази-одномерных системах, вызывающих сейчас значительный интерес, и изучения смешанных спин-зарядовых возбуждений. Цель настоящего раздела заключается в том, чтобы показать, что эта проблема может быть решена путем чисто электрических измерений динамического адмиттанса конечной одномерной системы. Это оказывается возможным, поскольку обе коллективные моды, возбужденные в системе с нарушенным спин-зарядовым разделением, переносят электрический заряд и потому дают вклад в электрический отклик системы. Это обстоятельство принципиально отличает рассматриваемую систему от системы со спин-зарядовым разделением, в которой для наблюдения спиновой моды используются магнитотуннельные эксперименты на

массиве квантовых проводов [282] или предлагается провести не менее сложные, но по сию пору не реализованные измерения спиновой плотности с временным разрешением [283].

Мы изучили адмиттанс одномерного квантового провода, подсоединенного к контактам, и показали, что в его зависимости от частоты содержатся характерные особенности спектра коллективных мод, позволяющие определить скорости обеих мод, а равно их спин-зарядовую структуру.

Конкретные вычисления проведены для конечного одномерного квантового провода с парным спин-орбитальным взаимодействием, вызванным зарядами изображения на расположенном вблизи провода металлическом затворе. Для простоты, сам затвор предполагается незаряженным, так что спин-орбитальное взаимодействие, не зависящее от плотности электронов, отсутствует. Мы также предполагаем, что величина парного спин-орбитального взаимодействия не настолько велика, чтобы система потеряла устойчивость.

Гамильтониан электронов в квантовом проводе дается уравнением (4.6). Условимся, что ось  $x$  направлена вдоль провода, ограниченного областью от  $-L/2$  до  $L/2$ , а ось  $y$  направлена нормально к затвору. Потенциал  $e$ - $e$  взаимодействия  $U(x_1, x_2)$ , экранированного зарядами изображения, принимается короткодействующим,  $U(x_1, x_2) = U\delta(x_1 - x_2)$ . Если расстояние  $d$  между затвором и проводом мало ( $k_F d \ll 1$ , где  $k_F$  есть фермиевское волновое число), то и нормальное электрическое поле зарядов изображения можно аппроксимировать как  $E(x_1, x_2) = E\delta(x_1 - x_2)$ . В этих предположениях бозонизованный гамильтониан системы, который дается уравнениями (4.27), (4.28) и (4.36), принимает вид

$$H_{\text{kin}} = \frac{\hbar v_F}{4\pi} \sum_{rs} \int : (\partial_x \phi_{rs})^2 : dx, \quad (4.39)$$

$$H_{e-e} = \frac{U}{8\pi^2} \sum_{\substack{r_1 r_2 \\ s_1 s_2}} r_1 r_2 \int : \partial_x \phi_{r_1 s_1} \partial_x \phi_{r_2 s_2} : dx, \quad (4.40)$$

$$H_{\text{ISOI}} = \frac{\alpha k_F E}{4\pi^2} \sum_{\substack{r_1 r_2 \\ s_1 s_2}} r_1 s_2 \int : \partial_x \phi_{r_1 s_1} \partial_x \phi_{r_2 s_2} : dx. \quad (4.41)$$

Контакты рассмотрены в модели одномерных невзаимодействующих эквивалентных проводников [83; 106; 284]. Разность потенциалов  $V \exp(-i\Omega t)$ , приложенная к контактам, падает симметрично в контактной области между токоподводящими электродами и квантовым проводом, так что пространственное распределение внешнего потенциала дается формулой

$$\varphi_{\text{ext}}(x,t) = \frac{V}{2} \left[ \theta\left(-x - \frac{L}{2}\right) - \theta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right] e^{-i\Omega t}. \quad (4.42)$$

Гамильтониан электронной системы в контактах включает в себя  $H_{\text{kin}}$  и

$$H_{\text{ext}} = -e \sum_s \int \psi_s^+(x) \varphi_{\text{ext}}(x,t) \psi_s(x) dx, \quad (4.43)$$

что в представлении бозонизации принимает вид

$$H_{\text{ext}} = -\frac{e}{2\pi} \sum_{rs} r \int \varphi_{\text{ext}}(x,t) \partial_x \phi_{rs} dx. \quad (4.44)$$

Динамика электронов в квантовом проводе под действием внешнего переменного поля описывается уравнением движения на бозонную фазу, из четырех компонент которой  $\phi_{rs}$  ( $r, s = \pm 1$ ) мы составим вектор  $\boldsymbol{\phi} = (\phi_{++}, \phi_{+-}, \phi_{-+}, \phi_{--})^T$ . Тогда

$$\mathbf{A} \partial_x \boldsymbol{\phi} = i\omega \boldsymbol{\phi}, \quad (4.45)$$

где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 + \mathcal{U} + \mathcal{E} & \mathcal{U} & -\mathcal{U} & -\mathcal{U} - \mathcal{E} \\ \mathcal{U} & 1 + \mathcal{U} - \mathcal{E} & -\mathcal{U} + \mathcal{E} & -\mathcal{U} \\ \mathcal{U} & \mathcal{U} - \mathcal{E} & -1 - \mathcal{U} + \mathcal{E} & -\mathcal{U} \\ \mathcal{U} + \mathcal{E} & \mathcal{U} & -\mathcal{U} & -1 - \mathcal{U} - \mathcal{E} \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Безразмерные переменные определены следующим образом. Введем характерное пролетное время  $\tau = L/v_F$ . Тогда  $\omega = \Omega\tau$ ,  $\mathcal{U} = U/hv_F$ ,  $\mathcal{E} = \alpha k_F E / \pi \hbar v_F$ , а  $x$  нормирован на  $L$ .

В контактах уравнение движения принимает вид:

$$r \partial_x \phi_{rs} = i\omega \phi_{rs} - \frac{\mathcal{V}}{2} \text{sign}(x), \quad (4.47)$$

где  $\mathcal{V} = eV\tau/\hbar$ . Выберем решения этого уравнения так, чтобы они описывали коллективные возбуждения, распространяющиеся в стороны от квантового провода, где они генерируются. Эти решения имеют вид

$$\phi_{rs} = i\frac{\mathcal{V}}{2\omega} + \begin{cases} \xi_s e^{-i\omega x}, & \text{для } r = -1 \\ 0, & \text{для } r = +1 \end{cases} \quad (4.48)$$

в левом контакте ( $x < -1/2$ ) и

$$\phi_{rs} = -i\frac{\mathcal{V}}{2\omega} + \begin{cases} 0, & \text{для } r = -1 \\ \xi_s e^{i\omega x}, & \text{для } r = +1 \end{cases} \quad (4.49)$$

в правом контакте ( $x > 1/2$ ).

Воспользовавшись непрерывностью  $\phi$  при  $x = \pm 1/2$ , мы получаем граничные условия для уравнения (4.45):

$$\begin{aligned} \phi_{++}|_{x=-\frac{1}{2}} &= \phi_{+-}|_{x=-\frac{1}{2}} = i\frac{\mathcal{V}}{2\omega}, \\ \phi_{-+}|_{x=\frac{1}{2}} &= \phi_{--}|_{x=\frac{1}{2}} = -i\frac{\mathcal{V}}{2\omega}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Решение уравнения (4.45) есть

$$\phi = \sum_{i=1}^4 C_i \mathbf{h}_i e^{i\frac{\omega}{\lambda_i} x}, \quad (4.51)$$

с константами  $C_i$ , определяемыми из уравнения (4.50). Собственные значения  $\lambda_i$  матрицы  $\mathbf{A}$ , отвечающие собственным векторам  $\mathbf{h}_i$ , равны  $\pm\lambda$  и  $\pm\Lambda$ , где

$$\lambda = \sqrt{1 + 2\mathcal{U} - 2\sqrt{\mathcal{U}^2 + \mathcal{E}^2}}, \quad (4.52)$$

$$\Lambda = \sqrt{1 + 2\mathcal{U} + 2\sqrt{\mathcal{U}^2 + \mathcal{E}^2}}. \quad (4.53)$$

Эти собственные значения суть безразмерные скорости коллективных возбуждений в проводе, как видно из уравнения (4.51). Дисперсионные уравнения для обеих ветвей коллективных возбуждений таковы:  $\omega_\lambda = \lambda q$  и  $\omega_\Lambda = \Lambda q$ .

В отсутствие парного спин-орбитального взаимодействия ( $\mathcal{E} = 0$ ), возбуждения существуют независимо в зарядовом и спиновом секторе. В случае отталкивающего

электрон-электронного взаимодействия, скорость плазмонов  $\Lambda > 1$  возрастает с ростом взаимодействия, тогда как скорость спинов  $\lambda = 1$  в рамках этой модели не перенормируется.

Парное спин-орбитальное взаимодействие нарушает спин-зарядовое разделение между модами. В результате моды приобретают сложную спин-зарядовую структуру, зависящую от амплитуды парной спин-орбиты. Вообще говоря, при  $\mathcal{E} \neq 0$  обе моды переносят как заряд, так и спин, и обе дают вклад в электрический отклик системы.

Спин-зарядовая структура коллективных возбуждений количественно описывается параметром спин-зарядового разделения  $\xi$ , который определяется для каждой из ветвей как [168]

$$\xi_{\lambda(\Lambda)} = \frac{n_{q\omega}^+ + n_{q\omega}^-}{n_{q\omega}^+ - n_{q\omega}^-} \Big|_{\omega=\omega_{\lambda(\Lambda)}}. \quad (4.54)$$

Здесь  $n_{q\omega}^s$  есть фурье-компонента электронной плотности со спином  $s$ , волновым вектором  $q$ , и частотой  $\omega$ , образующей соответствующее коллективное возбуждение. Чисто спиновое возбуждение отвечает величине  $\xi = 0$ , тогда как чисто зарядовому возбуждению соответствует  $\xi \rightarrow \infty$ . Важно отметить, что  $\xi$  непосредственно определяется скоростью возбуждений. Так,

$$\xi_{\lambda} = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{1 - \lambda^2}{\Lambda^2 - 1}} \quad (4.55)$$

и

$$\xi_{\Lambda} = \frac{1}{\Lambda} \sqrt{\frac{\Lambda^2 - 1}{1 - \lambda^2}}. \quad (4.56)$$

Зависящий от координаты  $x$  электронный ток в проводе определяется из уравнения непрерывности для электронной плотности. Он равен [26]

$$j_{\omega}(x) = -\frac{ie\omega}{2\pi} \sum_{rs} r\phi_{rs}(x). \quad (4.57)$$

Согласно теореме Шокли [83; 285], наблюдаемый ток, определяемый как поток заряда через токоподводящие электроды, равен

$$J = \frac{1}{V} \int_{-L/2}^{L/2} j(x) E_{\text{ext}}(x) dx, \quad (4.58)$$

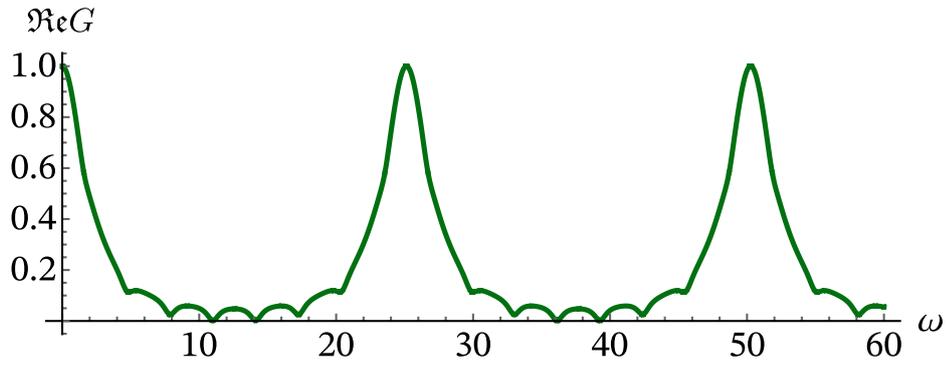


Рисунок 4.8 — Действительная часть адмиттанса в зависимости от частоты для электронов с короткодействующим отталкиванием и парным спин-орбитальным взаимодействием ( $\Lambda = 4$ ,  $\lambda = 0.5$ ).

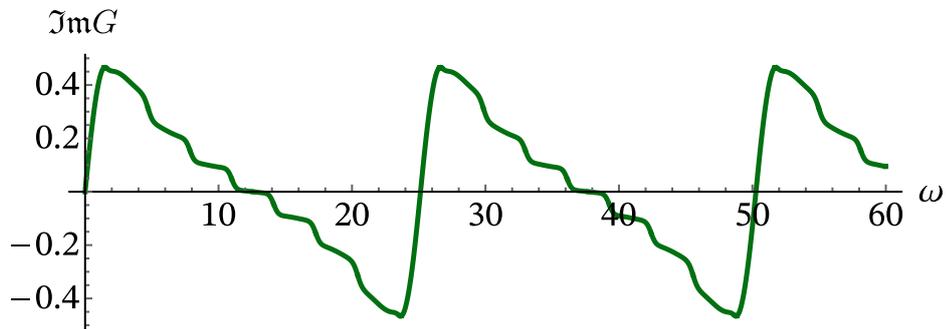


Рисунок 4.9 — Мнимая часть адмиттанса в зависимости от частоты для электронов с короткодействующим отталкиванием и парным спин-орбитальным взаимодействием ( $\Lambda = 4$ ,  $\lambda = 0.5$ ).

где  $E_{\text{ext}}(x) = -\nabla\varphi_{\text{ext}}$  есть внешнее поле вдоль траектории электрона. Тривиальным емкостным током между контактами мы пренебрегаем.

Адмиттанс  $G_\omega = J_\omega/V$ , нормированный на  $G_0 = 2e^2/h$ , равен

$$G_\omega = \frac{1 - \lambda^2}{\Lambda^2 - \lambda^2} \frac{1}{1 - i\lambda \operatorname{tg} \frac{\omega}{2\lambda}} + \frac{\Lambda^2 - 1}{\Lambda^2 - \lambda^2} \frac{1}{1 - i\Lambda \operatorname{tg} \frac{\omega}{2\Lambda}}. \quad (4.59)$$

В предельном случае нулевого парного спин-орбитального взаимодействия ( $\lambda = 1$ ), это выражение сводится к  $G_\omega = \left(1 - i\Lambda \operatorname{tg} \frac{\omega}{2\Lambda}\right)^{-1}$ , что согласуется с работой [82]. Действительная часть адмиттанса осциллирует в зависимости от частоты между нулем и  $G_0$ . На резонансных частотах  $\operatorname{Re}[G]$  обращается в ноль. В этом режиме электроны в проводе осциллируют между контактами, полностью от них отражаясь. Поэтому компонента тока, находящаяся в фазе с внешним напряжением, обращается в ноль. Условия возникновения резонанса таковы:  $\omega = \pi(2n + 1)\Lambda$  для целого  $n$ , что

означает, что частота есть целое кратное от обратного времени пролета коллективных возбуждений через провод. Единственным коллективным возбуждением, создающим ток в отсутствие парного спин-орбитального взаимодействия, является плазмон со скоростью  $\Lambda$ , перенормированной электрон-электронным взаимодействием. Следовательно, нули  $Re[G]$  дают информацию о том, как межэлектронное взаимодействие влияет на скорость возбуждений [82; 83].

При наличии парного спин-орбитального взаимодействия, обе моды дают вклад в адмиттанс с определенными весами. Результирующая осцилляторная картина, возникающая из-за интерференции коллективных мод, имеет теперь две характерные частоты, отвечающие различным пролетным временам быстрой и медленной коллективной моды, как видно из Рисунков 4.8 и 4.9. За исключением случая соизмеримых пролетных частот, который возможен лишь если  $\Lambda$  и  $\lambda$  соизмеримы,  $Re[G]$  не обращается более в точности в ноль в своих минимумах.

Скорости мод могут быть экспериментально определены по частотной зависимости адмиттанса. Например, это можно сделать с помощью фурье-анализа адмиттанса  $G_\omega$ . Так, первая его гармоника равна

$$\tilde{G}_{2\pi\lambda} = \frac{2\lambda}{\Lambda^2 - \lambda^2} \frac{1 - \lambda}{1 + \lambda} \exp\left(i\frac{\omega}{\lambda}\right). \quad (4.60)$$

Отметим, что в случае сильного парного спин-орбитального взаимодействия имеет место соотношение  $\lambda \ll \Lambda$ , то есть характерные частоты в  $G_\omega$  резко отличаются.

В заключение, мы показали, что парное спин-орбитальное взаимодействие в одномерных системах приводит к нарушению спин-зарядового разделения коллективных возбуждений, так что образуются две моды, в которых зарядовая и спиновая степени свободы смешаны. Благодаря этому обе моды проявляются в электрических откликах и таким образом появляется возможность их изучения электрическими методами. Мы детально проанализировали эту возможность для одномерной электронной системы со спин-орбитальным взаимодействием, индуцированным зарядами изображения. Мы изучили частотную зависимость адмиттанса и установили, что действительная и мнимая его части часть обнаруживают осцилляторное поведение, отражающее наличие резонансов на пролетных частотах для обеих

мод. Анализ частотной зависимости адмиттанса позволяет определить их скорости и спин-зарядовую структуру. При достаточно сильном спин-орбитальном взаимодействии скорость одной из мод сильно падает и образуется структура двухпериодных осцилляций.

#### 4.4 Диссипативная проводимость квантового провода с парным спин-орбитальным взаимодействием

На протяжении многих лет излюбленной площадкой для изучения многочастичных квантовых эффектов в одномерных системах были квантовые провода, сформированные электростатически в гетероструктурах с высокоподвижным двумерным электронным газом [10], а наиболее тонкими и прецизионными методами для извлечения многочастичных эффектов себя зарекомендовали динамические транспортные измерения [80].

В настоящее время наибольший интерес вызывают полупроводниковые квантовые провода на основе соединений  $A^{III}B^V$ , которые представляют собой важнейшие структурные элементы для топологических квантовых вычислений [204; 205] и спинтроники [37]. В частности, провода на основе InAs и InSb считаются весьма перспективными системами для реализации геликальных состояний и майорановских мод [40; 200—203]. В основе их свойств лежит сильное спин-орбитальное взаимодействие Рашбы, которое до сих пор учитывалось в литературе лишь в одночастичном приближении [260—268].

В предыдущем разделе мы изучили изолированно эффект парного спин-орбитального взаимодействия в динамической проводимости квантовых проводов, соединенных с контактами. Здесь же мы исследуем совместное проявление в динамическом транспорте в квантовых проводах одночастичного рашбовского взаимодействия и парного спин-орбитального взаимодействия электронов [169]. Обычно баллистическая проводимость в квантовых проводах определяется плаз-

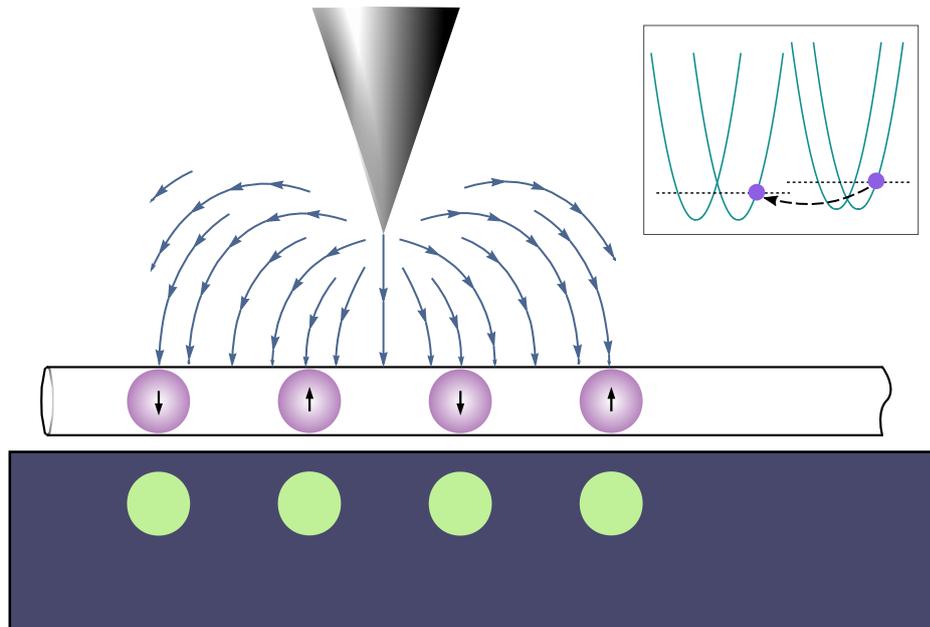


Рисунок 4.10 — Электроны в одномерном квантовом проводе вместе с зарядами, индуцированными на затворе. Линии электрического поля от заряженного острия микроскопа перпендикулярны проводу.

монами. Но поскольку при наличии парного спин-орбитального взаимодействия коллективные возбуждения в квантовом проводе имеют смешанную спин-зарядовую структуру, обе коллективные моды переносят заряд и, следовательно, совместно дают вклад в проводимость. Привлекательной особенностью рассматриваемых структур является возможность управлять спин-зарядовой структурой и скоростью мод, а тем самым, и проводимостью системы, при помощи напряжения на затворе.

Мы рассмотрим квантовый провод без токоподводящих электродов, которые, как хорошо известно, драматически подавляют эффекты взаимодействия в низкочастотной проводимости [10; 106; 284]. Для нахождения проводимости мы воспользуемся рассмотренной в разделе 1.4 моделью, в которой квантовый провод возмущается переменным электрическим полем, созданным проводящим острием сканирующего зондового микроскопа, как это показано на Рисунке 4.10. Проводимость системы определяется неинвазивно по диссипируемой в ней мощности, которую можно измерить методами термозондовой микроскопии [90].

Чтобы максимизировать вклад в парное спин-орбитальное взаимодействие от зарядов изображения на интерфейсе, мы рассмотрим схему, в которой квантовый провод лежит непосредственно на поверхности затвора, в духе экспериментов Декке-

ра с соавторами [286]. Поскольку разность потенциалов между проводом и затвором здесь пренебрежимо мала, электрическое поле заряженного зонда, заэкранированное затвором, оказывается перпендикулярно проводу. Другими словами, тянущего поля вдоль провода, обыкновенно вызывающего в нем ток, в этой системе нет, а ее проводимость определяется другим механизмом.

По мере приближения зонда к проводу, его электрическое поле растет быстрее потенциала, и дает существенный вклад в спин-орбитальное взаимодействие Рашбы. Порожденное полем заряженного зонда рашбовское взаимодействие изучалось в разделе 2.4 в статическом случае. Переменное электрическое поле зонда служит для электронов в проводе источником нестационарного спин-орбитального взаимодействия. Мы покажем, что оно приводит к возникновению в квантовом проводе электрического тока.

Механизм проводимости состоит в следующем. Величина спин-орбитального взаимодействия модулируется вдоль провода за счет переменного поля зонда. Это приводит к модуляции положения дна зоны проводимости, которое и вызывает перетекание электронов по направлению к локальным минимумам для определенной спиновой ориентации. При этом в системе возникает как спиновый, так и зарядовый ток. Этот процесс проиллюстрирован на вставке в Рисунок 4.10. Парное спин-орбитальное взаимодействие создает дополнительный механизм проводимости, замешивая зарядовые и спиновые возбуждения, созданные зондом.

Особого внимания заслуживает нетривиальная зависимость диссипативной проводимости от напряжения на затворе, отражающая эффект парного спин-орбитального взаимодействия. По мере увеличения потенциала затвора, смягчается одна из двух коллективных мод, возбужденных в системе зондом, а амплитуда ее растет. За счет этого растет и токовый отклик, а вместе с ним и проводимость системы, определенная по диссипируемой мощности.

Гамильтониан электронов в квантовом проводе дается уравнением (4.6). Обозначим  $u$ -компоненту неоднородного переменного электрического поля зонда, заэкранированного затвором, как  $\mathcal{E}(x,t)$ . Тогда оператор возмущения, созданного

зондом, принимает вид

$$\begin{aligned} H_{\text{ext}} &= \frac{\alpha}{2\hbar} \sum_s \int dx \psi_s^+(x) [\mathfrak{E}(x,t) \hat{p}_x + \hat{p}_x \mathfrak{E}(x,t)] s \psi_s(x) \\ &= -\frac{\alpha m}{e\hbar} \int \mathfrak{E}(x,t) j_\sigma(x) dx, \end{aligned} \quad (4.61)$$

где, как и в предыдущем разделе,  $j_\sigma(x) = \sum_s s j^{(s)}(x)$ , а

$$j^{(s)}(x) = -\frac{ie\hbar}{2m} [\partial_x \psi_s^+ \psi_s(x) - \psi_s^+(x) \partial_x \psi_s]. \quad (4.62)$$

Чтобы найти отклик системы на это возмущение, воспользуемся уравнением движения на квантовую функцию Вигнера. Эта техника особенно удобна для рассматриваемой задачи, поскольку отсутствие токоподводящих контактов в системе избавляет нас от нетривиальных проблем с формулировкой граничных условий для функции Вигнера [287]. Следуя методу раздела 4.2.1, получим в приближении случайных фаз следующее уравнение на фурье-преобразование функции Вигнера:

$$\begin{aligned} \hbar\omega f_1^{(s)}(q,p,\omega) &= \left( \frac{\hbar^2 pq}{m} + \alpha qs F_{\text{mean}} \right) f_1^{(s)}(q,p,\omega) \\ &- \left[ f_0^{(s)}\left(p + \frac{q}{2}\right) - f_0^{(s)}\left(p - \frac{q}{2}\right) \right] \times \\ &\left\{ \alpha ps \tilde{\mathfrak{E}}_{q\omega} - \frac{m\alpha}{e\hbar} E_q \sum_\zeta \zeta j_{q\omega}^{(\zeta)} + (U_q + \alpha ps E_q) \sum_\zeta n_{q\omega}^{(\zeta)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.63)$$

где  $\tilde{\mathfrak{E}}_{q\omega}$  обозначает фурье-преобразование от  $\mathfrak{E}(x,t)$ .

Чтобы вывести замкнутую систему уравнений на  $n_{q\omega}^{(s)}$ , сначала проинтегрируем уравнение (4.63) по  $p$ :

$$\omega e n_{q\omega}^{(s)} + q j_{q\omega}^{(s)} = \frac{\alpha}{2\hbar} q s e n_0 \tilde{\mathfrak{E}}_{q\omega} + \frac{\alpha q s e}{2\hbar} \left[ 2F_{\text{mean}} n_{q\omega}^{(s)} + E_q n_0 \sum_\zeta n_{q\omega}^{(\zeta)} \right]. \quad (4.64)$$

Подставим взятое отсюда выражение для  $j_{q\omega}^{(s)}$  в (4.63). Выразим из получившегося уравнения  $f_1^{(s)}(q,p,\omega)$  и проинтегрируем его по  $p$ . Тогда мы придем к системе, в которой зацеплены неизвестные величины  $n_{q\omega}^{(s)}$  при  $s = \pm 1$ :

$$\begin{aligned} n_{q\omega}^{(s)} \left( (\mathcal{F} + \mathcal{E}_q/2) \mathcal{E}_q \alpha_*^2 - \mathcal{U}_q + v_q^2 - 1 - \alpha_* s v_q \mathcal{E}_q \right) \\ + n_{q\omega}^{(-s)} \left( (\mathcal{F} + \mathcal{E}_q/2) \mathcal{E}_q \alpha_*^2 - \mathcal{U}_q \right) = \varphi_{q\omega}^{(s)}, \end{aligned} \quad (4.65)$$

где спин-зависимое возмущение дается формулой

$$\varphi_{q\omega}^{(s)} = \frac{\alpha_* s}{2} \mathfrak{E}_{q\omega} v_q - \frac{\alpha_*^2}{2} \mathfrak{E}_{q\omega} (\mathcal{F} + \mathcal{E}_q), \quad (4.66)$$

и наряду с введенными в разделе 4.2.1 безразмерными величинами  $\mathcal{U}_q = \frac{U_q}{\pi \hbar v_F}$ ,  $\mathcal{F} = \frac{F_{\text{mean}}}{en_0^2}$ , и  $\mathcal{E}_q = \frac{E_q}{en_0}$ , обозначено дополнительно  $\mathfrak{E}_{q\omega} = \frac{\tilde{\mathfrak{E}}_{q\omega}}{en_0}$ .

Первый член в правой части уравнения (4.66) описывает возмущение в спиновом секторе, вызванное непосредственно спин-орбитальным взаимодействием, созданным зондом. Этот член линеен по  $\alpha_*$ . Второй член описывает косвенное возбуждение зарядового сектора, возникающее благодаря наличию в системе спин-орбитального взаимодействия. Его величина, соответственно, пропорциональна  $\alpha_*^2$ .

Восприимчивости плотности заряда и спина  $\chi_{q\omega}^\rho = (n_{q\omega}^{(+)} + n_{q\omega}^{(-)})/\mathfrak{E}_{q\omega}$  и  $\chi_{q\omega}^\sigma = (n_{q\omega}^{(+)} - n_{q\omega}^{(-)})/\mathfrak{E}_{q\omega}$  равны ( $\omega \rightarrow \omega + i0$ )

$$\chi_{q\omega}^\rho = \alpha_*^2 \frac{\mathcal{E}_q + \mathcal{F}(1 - v_q^2)}{(v_q^2 - v_+^2)(v_q^2 - v_-^2)} \quad (4.67)$$

и

$$\chi_{q\omega}^\sigma = \alpha_* v_q \frac{v_q^2 - 1 - 2\mathcal{U}_q + \alpha_*^2 \mathcal{F} \mathcal{E}_q}{(v_q^2 - v_+^2)(v_q^2 - v_-^2)}. \quad (4.68)$$

Их зависимость от  $\alpha_*$  объясняется аналогично уравнению (4.66).

В соответствии с уравнением (4.61), закачанная в систему мощность равна

$$\begin{aligned} P(\omega) &= -\frac{\alpha m}{e\hbar} \int \overline{\frac{\partial \mathfrak{E}}{\partial t} \langle j_\sigma(x) \rangle} dx \\ &= \frac{\alpha_* \hbar}{4e} \int_0^\infty \omega \Im m \chi_{q\omega}^{j\sigma} |\mathfrak{E}_{q\omega}|^2 dq. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Восприимчивость  $\chi_{q\omega}^{j\sigma} = \sum_s s j_{q\omega}^{(s)}/\mathfrak{E}_{q\omega}$  можно определить из уравнения (4.64), которое представляет собой уравнение непрерывности для системы со спин-орбитальным взаимодействием. Второй член в его правой части отражает механизмы перемешивания зарядовой и спиновой степеней свободы, возникающие в системе со спин-орбитальным взаимодействием. Используя уравнение (4.64), мы получим

$$\chi_{q\omega}^{j\sigma} = \alpha_* e v_F \frac{(1 + \alpha_*^2 \mathcal{F}^2)(1 - v_q^2) + 2\mathcal{U}_q}{(v_q^2 - v_+^2)(v_q^2 - v_-^2)}. \quad (4.70)$$

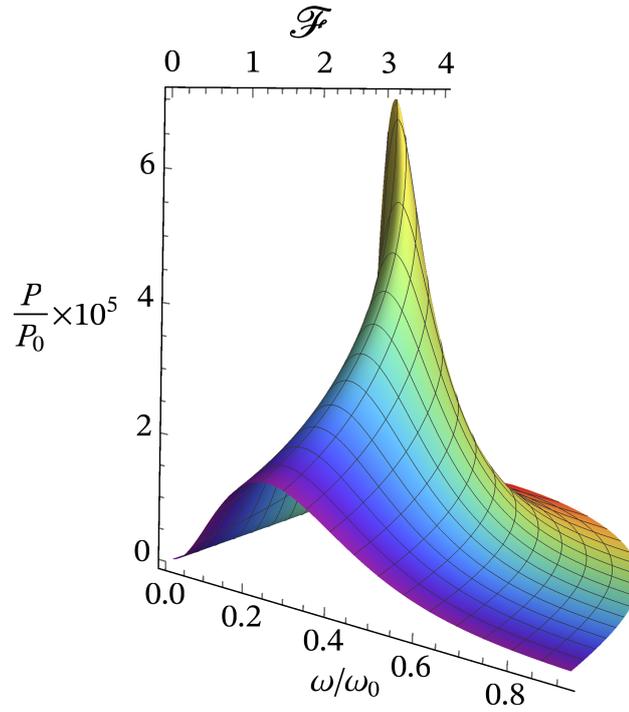


Рисунок 4.11 — Диссипируемая мощность в зависимости от частоты поля зонда и величины поля затвора. Заряженное острие зонда моделируется как периодически зависящий от времени точечный заряд  $Q$ , расположенный на высоте  $L$  над проводом. Величины нормированы на  $\omega_0 = v_F k_F$  и  $P_0 = h\omega_0^2 Q^2 / e^2$ . Параметры системы таковы:

$$k_F a_B = 1.27, d = 0.078 a_B, a = 0.39 a_B, L = 3.9 a_B, \alpha_* = 0.1.$$

Мнимая часть восприимчивости для  $\omega > 0$  равна

$$\begin{aligned} \Im \chi_{q\omega}^{j\sigma} = & \left[ \frac{(1 - v_-^2)(1 + \alpha_*^2 \mathcal{F}^2) + 2\mathcal{U}_q}{2v_-(v_+^2 - v_-^2)} \delta(\omega - qv_- v_F) \right. \\ & \left. + \frac{(v_+^2 - 1)(1 + \alpha_*^2 \mathcal{F}^2) - 2\mathcal{U}_q}{2v_+(v_+^2 - v_-^2)} \delta(\omega - qv_+ v_F) \right] \pi \alpha_* e v_F^2 q. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Ведущий вклад в диссипируемую мощность создается первой  $\delta$ -функцией,

$$P(\omega) = \alpha_*^2 h \omega^2 |\mathfrak{C}_{q\omega}|^2 \frac{(1 - v_-^2)(1 + \alpha_*^2 \mathcal{F}^2) + 2\mathcal{U}_q}{16v_-^3 (v_+^2 - v_-^2) \left(1 + \frac{\omega}{v_-^2 v_F} \frac{\partial v_-}{\partial q}\right)}, \quad (4.72)$$

где  $q$  должно определяться из  $\omega = qv_-(q)v_F$ . Зависимость скорости коллективной моды  $v_-(\mathcal{F})$  от электрического поля затвора приводит к острому пику в  $P(\omega, \mathcal{F})$ , как показано на Рисунке 4.11.

В заключение этого раздела, подведем его итоги. Мы рассматривали одномерный квантовый провод с близко расположенным затвором, возбуждаемый бесконтактным образом при помощи переменного электрического поля заряженного

острия зондового микроскопа. Электроны в проводе возбуждаются не тянущим электрическим полем, которого нет в этой схеме, а нестационарным спин-орбитальным взаимодействием, созданным полем острия. Мы показали, что под его действием в системе возникает зарядовый и спиновый ток электронов. Парное спин-орбитальное взаимодействие проявляется в токовом отклике, приводя к перемешиванию зарядовых и спиновых возмущений, созданных зондом. Скорость коллективных возбуждений сильно перенормируется парным спин-орбитальным взаимодействием, благодаря чему появляется возможность управления зарядовым и спиновым откликом одномерной электронной системы путем изменения напряжения на затворе. При увеличении этого напряжения, одна из мод смягчается, за счет чего возрастает токовый отклик и диссипируемая в системе мощность.

## 4.5 Заключение

Последняя глава диссертации посвящена проявлениям парного спин-орбитального взаимодействия в многоэлектронной системе. Совместное существование дальнедействующего отталкивания электронов и притяжения их на малых расстояниях открывает широкий спектр возможных сценариев формирования многочастичного состояния, которое, без сомнения, включает сверхпроводящее состояние и такие явления, как образование электронных комплексов, самопроизвольное редуцирование симметрии системы и кластеризация электронов в геометрические структуры. Всестороннее изучение различных аспектов многочастичных состояний является интересной проблемой, которая требует дальнейших исследований.

На сегодняшний день многоэлектронная проблема изучалась только для одномерных систем с использованием различных подходов, ограниченных рассмотрением крупномасштабных флуктуаций. Когда парное спин-орбитальное взаимодействие не слишком велико, оно нарушает спин-зарядовое разделение и радикально перестраи-

вает коллективные возбуждения в системе. Вместо чисто зарядовых и спиновых мод, которые существуют без парного спин-орбитального взаимодействия, образуются две моды со смешанной спин-зарядовой структурой, одна из которых сильно смягчается в длинноволновой области с ростом спин-орбитального взаимодействия. При критическом значении параметра спин-орбитального взаимодействия система теряет устойчивость, что указывает на то, что в системе возникает тенденция к радикальной перестройке основного состояния.

Парное спин-орбитальное взаимодействие является новой темой в физике электронных систем в твердом теле, которая возникла совсем недавно и еще очень мало изучена, и поэтому существует большое количество неисследованных проблем. Принципиальное различие между парным спин-орбитальным взаимодействием и широко изученным одночастичным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы заключается в том, что парное спин-орбитальное взаимодействие проявляется непосредственно во взаимодействии между частицами и, таким образом, существенно влияет на структуру коррелированного электронного состояния. Парное спин-орбитальное взаимодействие имеет универсальный характер, хотя его проявления, безусловно, зависят от деталей конкретной электронной системы. Нет сомнений в том, что парное спин-орбитальное взаимодействие также существует и в топологически нетривиальных электронных системах, полуметаллах Дирака и Вейля, однако описание парного спин-орбитального взаимодействия в этих системах может существенно отличаться от рассмотренной здесь простой однозонной модели с квадратичным зонным спектром. Насколько нам известно, такие исследования в литературе еще не проводились, но очевидно, что наиболее впечатляющая особенность парного спин-орбитального взаимодействия, а именно короткодействующее притяжение электронов в определенных спиновых конфигурациях, сопряженное с дальнедействующим кулоновским отталкиванием, должна иметь место для каждой из вышеперечисленных систем. Такая необычная форма электрон-электронного взаимодействия может привести к нетривиальным эффектам в топологических сверхпроводящих системах, построенных на базе одномерной или двумерной электронной системы со спин-орбитальным взаимодействием и сверхпроводником,

даже в случае, когда парное спин-орбитальное взаимодействие не является особенно сильным. Поэтому концепция парного спин-орбитального взаимодействия открывает перспективное направление будущих исследований сильно коррелированных электронных систем.

## Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. В рамках кейновской модели зонного спектра в работе построена теория парного спин-орбитального взаимодействия электронов в твёрдых телах и актуальных низкоразмерных структурах с учетом геометрии электрических полей, порождающих спин-орбитальное взаимодействие. Показано, что благодаря ему в гамильтониане электрон-электронного взаимодействия появляется зависящий от спина вклад, который оказывается существенным в материалах с сильным эффектом Рашбы.
2. Парное спин-орбитальное взаимодействие является притягивающим для электронов в определенных спиновых конфигурациях, привязанных к импульсу, и конкурирует с кулоновским отталкиванием электронов. При определенных условиях, достижимых в современных низкоразмерных структурах, парное спин-орбитальное взаимодействие оказывается преобладающим. Обусловленное им притяжение между электронами приводит к образованию связанных электронных пар, которые бывают двух различных типов в зависимости от характера движения электронов. Энергией связи этих пар можно управлять электрическими методами.
3. В многоэлектронных системах выявлен механизм неустойчивости по отношению к флуктуациям плотности заряда, который обязан своим возникновением парному спин-орбитальному взаимодействию. Этот эффект был исследован на примере одномерных систем с расположенным вблизи них затвором. Парное спин-орбитальное взаимодействие порождается в этих системах зарядами изображения, которые одномерные электроны индуцируют на затворе. Показано, что одна из двух мод коллективных возбуждений одномерной системы смягчается в длинноволновой части спектра, а ее скорость на пороге неустойчивости уменьшается до нуля вместе с зарядовой жесткостью системы.

4. Показано, что существует диапазон величины парного спин-орбитального взаимодействия, от нуля до определенной критической, в котором одномерная электронная система является устойчивой, и детально исследовано, как с ростом этой величины меняются спектр и спин-зарядовая структура коллективных возбуждений системы вплоть до порога неустойчивости. Парное спин-орбитальное взаимодействие приводит к нарушению спин-зарядового разделения в латтинджеровой жидкости и к перестройке коллективных возбуждений в системе, которые приобретают смешанную спин-зарядовую структуру, за счет чего обе коллективные моды дают вклад в электрический отклик системы. Скорости обеих мод перенормируются взаимодействием.
5. В работе построена теория токового отклика одномерной системы с нарушенным спин-зарядовым разделением. Установлено, что частотная зависимость динамического адмиттанса квантовых проводов имеет осцилляционную структуру с двумя характерными частотами, отражающим резонансы Фабри-Перо на длине провода между контактами. По резонансным частотам можно установить скорости обеих коллективных мод, их спин-зарядовую структуру, и определить величину парного спин-орбитального взаимодействия.
6. Предложен механизм электронной проводимости, который основан на управлении электронами при помощи нестационарного спин-орбитального взаимодействия, порожденного внешним переменным электрическим полем. Показано, что в одномерном квантовом проводе с близлежащим затвором возникает зарядовый и спиновый ток, даже если тянущее электрическое поле в системе полностью заэкранировано затвором. Существенный вклад в токовый отклик и диссипативную проводимость системы вносит парное спин-орбитальное взаимодействие, а их величинами можно управлять чисто электрическими методами, изменяя напряжение на затворе.
7. Изучена структура коррелированного электронного состояния с вигнеровским упорядочением, которое формируется в одномерных квантовых точках. В функции распределения электронов по одночастичным состоя-

- ниям и в фурье-спектре электронной плотности найдены универсальные закономерности, которые отражают деформацию вигнеровского кристалла за счет границ системы. Функция распределения по одночастичным состояниям содержит  $\delta$ -образный пик на фермиевском импульсе  $q = k_F$  на фоне плавной зависимости от  $q$ . Фурье-спектр плотности имеет особенность в виде ступеньки на удвоенном фермиевском импульсе  $2k_F$ , так что Фурье-гармоники с волновым вектором больше этой величины отсутствуют или исчезающе малы. При построении аналитической теории деформированного вигнеровского кристалла исправлена давняя ошибка латтинджерской модели: оператор плотности электронов в ней нарушал условие полной электронной нейтральности. В работе построен формализм бозонизации, сохраняющий полное число частиц в системе.
8. Показано, что короткомасштабные корреляции электронов приводят к возникновению мягкой моды в окрестности удвоенного фермиевского волнового числа в спектре коллективных зарядовых возбуждений латтинджерской жидкости в отсутствие электрон-фононного взаимодействия, а также дают вклад в динамическую проводимость системы, который при определенных условиях оказывается преобладающим.
  9. Показано, что синглет-триплетным переходом в одномерной квантовой точке можно управлять путем модуляции электрон-электронного взаимодействия. При увеличении кулоновского взаимодействия электронов значительно уменьшается критическое магнитное поле и энергетическая щель в спектре. Локальным внешним электрическим потенциалом также управляется спиновое состояние вигнеровской молекулы в одномерной квантовой точке. Манипуляция спином становится возможной благодаря совместному эффекту сильного электрон-электронного взаимодействия и большого локального потенциала в присутствии внешнего магнитного поля, превосходящего определенную критическую величину.

## **Благодарности**

Большое спасибо Владимиру Алексеевичу Сабликову за неизменную поддержку и помощь, далеко выходящие за рамки научного руководства.

Специальное спасибо моей семье, без настойчивости которой эта диссертация никогда не была бы написана.

## Список литературы

1. *Martin, R. M.* Interacting Electrons: Theory and Computational Approaches / R. M. Martin, L. Reining, D. M. Ceperley. — Cambridge University Press, 2016.
2. *Abrikosov, A. A.* Methods of quantum field theory in statistical physics / A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski. — Dover, 1975.
3. *Pines, D.* Theory of Quantum Liquids: Normal Fermi Liquids / D. Pines, P. Nozières. — CRC Press, 2018.
4. *Giuliani, G.* Quantum Theory of the Electron Liquid / G. Giuliani, G. Vignale. — Cambridge University Press, 2005.
5. *Combescot, M.* Excitons and Cooper pairs: two composite bosons in many-body physics / M. Combescot, S.-Y. Shiau. — Oxford University Press, 2015.
6. *Kagan, M. Y.* Modern trends in superconductivity and superfluidity. Т. 874 / M. Y. Kagan. — Springer, 2013. — (Lecture Notes in Physics).
7. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides / B. Keimer [и др.] // Nature. — 2015. — Т. 518. — С. 179.
8. *Sachdev, S.* Quantum Phase Transitions / S. Sachdev. — 2-е изд. — Cambridge University Press, 2011.
9. *Hewson, A. C.* The Kondo Problem to Heavy Fermions / A. C. Hewson. — Cambridge University Press, 1993. — (Cambridge Studies in Magnetism).
10. Ballistic Transport in 1D GaAs/AlGaAs Heterostructures / W. Clarke [и др.] // Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. — Elsevier, 2016.
11. *Roth, S.* One-dimensional metals: conjugated polymers, organic crystals, carbon nanotubes and graphene / S. Roth, D. Carroll. — John Wiley & Sons, 2015.
12. Quantum transport in carbon nanotubes / E. A. Laird [и др.] // Rev. Mod. Phys. — 2015. — Т. 87, вып. 3. — С. 703—764.

13. *Reimann, S. M.* Electronic structure of quantum dots / S. M. Reimann, M. Manninen // *Rev. Mod. Phys.* — 2002. — Т. 74, вып. 4. — С. 1283—1342.
14. Spins in few-electron quantum dots / R. Hanson [и др.] // *Rev. Mod. Phys.* — 2007. — Т. 79, вып. 4. — С. 1217—1265.
15. *Shen, S.-Q.* Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter / S.-Q. Shen. — Springer Singapore, 2017.
16. *Ortmann, F.* Topological insulators: Fundamentals and perspectives / F. Ortmann, S. Roche, S. O. Valenzuela. — Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2015.
17. Large Tunable Rashba Spin Splitting of a Two-Dimensional Electron Gas in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  / P. D. C. King [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Т. 107, вып. 9. — С. 096802.
18. Giant Rashba-type spin splitting in bulk BiTeI / K. Ishizaka [и др.] // *Nature materials.* — 2011. — Т. 10, № 7. — С. 521.
19. *Singh, S.* Giant tunable Rashba spin splitting in a two-dimensional BiSb monolayer and in BiSb/AlN heterostructures / S. Singh, A. H. Romero // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Т. 95, вып. 16. — С. 165444.
20. 2D transition metal dichalcogenides / S. Manzeli [и др.] // *Nature Reviews Materials.* — 2017. — Т. 2, № 8. — С. 17033.
21. Evidence of large spin-orbit coupling effects in quasi-free-standing graphene on Pb/Ir (1 1 1) / M. M. Otrokov [и др.] // *2D Materials.* — 2018. — Т. 5, № 3. — С. 035029.
22. Proximity-induced spin-orbit effects in graphene on Au / A. López [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Т. 99, вып. 8. — С. 085411.
23. Giant Rashba Splitting in  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$  Organic-Inorganic Perovskite / D. Niesner [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2016. — Т. 117, вып. 12. — С. 126401.
24. A new spin for oxide interfaces / J. Varignon [и др.] // *Nature Physics.* — 2018. — Т. 14, № 4. — С. 322.

25. *Ferry, D. K.* Transport in Nanostructures / D. K. Ferry, S. M. Goodnick, J. Bird. — 2-е изд. — Cambridge University Press, 2009.
26. *Voit, J.* One-dimensional Fermi liquids / J. Voit // Reports on Progress in Physics. — 1995. — Т. 58, № 9. — С. 977.
27. *Gogolin, A. O.* Bosonization and strongly correlated systems / A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, A. M. Tsvelik. — Cambridge University Press, 2004.
28. *Giamarchi, T.* Quantum physics in one dimension / T. Giamarchi. — Clarendon press, 2003.
29. *Jain, J. K.* Composite fermions / J. K. Jain. — Cambridge University Press, 2007.
30. *Tong, D.* Lectures on the Quantum Hall Effect / D. Tong // arXiv e-prints. — 2016. — arXiv:1606.06687.
31. *Emery, V. J.* Stripe phases in high-temperature superconductors / V. J. Emery, S. A. Kivelson, J. M. Tranquada // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 1999. — Т. 96, № 16. — С. 8814—8817.
32. *Oganesyan, V.* Quantum theory of a nematic Fermi fluid / V. Oganesyan, S. A. Kivelson, E. Fradkin // Phys. Rev. B. — 2001. — Т. 64, вып. 19. — С. 195109.
33. *Winkler, R.* Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. Т. 191 / R. Winkler ; под ред. J. Kühn [и др.]. — Springer, Berlin/Heidelberg, 2003. — (Springer Tracts in Modern Physics).
34. New perspectives for Rashba spin-orbit coupling / A. Manchon [и др.] // Nature materials. — 2015. — Т. 14, № 9. — С. 871—882.
35. *Bihlmayer, G.* Focus on the Rashba effect / G. Bihlmayer, O. Rader, R. Winkler // New Journal of Physics. — 2015. — Т. 17, № 5. — С. 050202.
36. *Bansil, A.* Colloquium: Topological band theory / A. Bansil, H. Lin, T. Das // Rev. Mod. Phys. — 2016. — Т. 88, вып. 2. — С. 021004.
37. *Bandyopadhyay, S.* Introduction to Spintronics / S. Bandyopadhyay, M. Cahay. — CRC Press, Boca Raton, 2016.

38. *Vanderbilt, D.* Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators / D. Vanderbilt. — Cambridge University Press, 2018.
39. Spin Hall effects / J. Sinova [и др.] // *Rev. Mod. Phys.* — 2015. — Т. 87, вып. 4. — С. 1213—1260.
40. Majorana zero modes in superconductor–semiconductor heterostructures / R. Lutchyn [и др.] // *Nature Reviews Materials.* — 2018. — Т. 3. — С. 52.
41. Spin Physics in Semiconductors. Т. 157 / под ред. М. И. Dyakonov. — Springer International Publishing, 2017. — (Springer Series in Solid-State Sciences).
42. *Bethe, H. A.* Quantum mechanics of one- and two-electron atoms / H. A. Bethe, E. E. Salpeter. — Springer, Berlin, 1957.
43. *Reiher, M.* Relativistic quantum chemistry: the fundamental theory of molecular science / M. Reiher, A. Wolf. — John Wiley & Sons, 2014.
44. *Cuniberti, G.* Transport and elementary excitations of a Luttinger liquid / G. Cuniberti, M. Sassetti, B. Kramer // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 1996. — Т. 8, № 2. — С. L21—L26.
45. *Fabrizio, M.* Interacting one-dimensional electron gas with open boundaries / M. Fabrizio, A. O. Gogolin // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Т. 51, вып. 24. — С. 17827—17841.
46. *Luttinger, J. M.* An Exactly Soluble Model of a Many-Fermion System / J. M. Luttinger // *Journal of Mathematical Physics.* — 1963. — Т. 4, № 9. — С. 1154—1162.
47. *Tomonaga, S.-i.* Remarks on Bloch's Method of Sound Waves applied to Many-Fermion Problems / S.-i. Tomonaga // *Progress of Theoretical Physics.* — 1950. — Т. 5, № 4. — С. 544—569.
48. *Mattis, D. C.* Exact Solution of a Many-Fermion System and Its Associated Boson Field / D. C. Mattis, E. H. Lieb // *Journal of Mathematical Physics.* — 1965. — Т. 6, № 2. — С. 304—312.

49. *Friedel, J.* Metallic alloys / J. Friedel // Il Nuovo Cimento. — 1958. — Т. 7. — С. 287—311.
50. *Mermin, N. D.* Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models / N. D. Mermin, H. Wagner // Phys. Rev. Lett. — 1966. — Т. 17, вып. 22. — С. 1133—1136.
51. *Egger, R.* Friedel Oscillations for Interacting Fermions in One Dimension / R. Egger, H. Grabert // Phys. Rev. Lett. — 1995. — Т. 75, вып. 19. — С. 3505—3508.
52. *Yue, D.* Conduction of a weakly interacting one-dimensional electron gas through a single barrier / D. Yue, L. I. Glazman, K. A. Matveev // Phys. Rev. B. — 1994. — Т. 49, вып. 3. — С. 1966—1975.
53. *Rommer, S.* Spin- and charge-density oscillations in spin chains and quantum wires / S. Rommer, S. Eggert // Phys. Rev. B. — 2000. — Т. 62, вып. 7. — С. 4370—4382.
54. Impurity in a Luttinger liquid away from half-filling: A numerical study / S. Qin [и др.] // Phys. Rev. B. — 1997. — Т. 56, вып. 15. — С. 9766—9774.
55. *White, S. R.* Friedel oscillations and charge density waves in chains and ladders / S. R. White, I. Affleck, D. J. Scalapino // Phys. Rev. B. — 2002. — Т. 65, вып. 16. — С. 165122.
56. *Lesage, F.* Form-factors computation of Friedel oscillations in Luttinger liquids / F. Lesage, H. Saleur // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1997. — Т. 30, № 14. — С. L457—L463.
57. *Kane, C. L.* Transport in a one-channel Luttinger liquid / C. L. Kane, M. P. A. Fisher // Phys. Rev. Lett. — 1992. — Т. 68, вып. 8. — С. 1220—1223.
58. *Kane, C. L.* Transmission through barriers and resonant tunneling in an interacting one-dimensional electron gas / C. L. Kane, M. P. A. Fisher // Phys. Rev. B. — 1992. — Т. 46, вып. 23. — С. 15233—15262.
59. *Furusaki, A.* Resonant tunneling in a Luttinger liquid / A. Furusaki, N. Nagaosa // Phys. Rev. B. — 1993. — Т. 47, вып. 7. — С. 3827—3831.

60. *Koutouza, A.* External voltage sources and tunnelling in quantum wires / A. Koutouza, F. Siano, H. Saleur // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 2001. — Т. 34, № 27. — С. 5497—5515.
61. Current Bistability and Hysteresis in Strongly Correlated Quantum Wires / R. Egger [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Т. 84, вып. 16. — С. 3682—3685.
62. *Hubbard, J.* The description of collective motions in terms of many-body perturbation theory / J. Hubbard // *Proc. R. Soc. Lond. A*. — 1957. — Т. 240.
63. *Singwi, K.* Correlations in Electron Liquids / K. Singwi, M. Tosi // Т. 36 / под ред. H. Ehrenreich, F. Seitz, D. Turnbull. — Academic Press, 1982. — С. 177—266. — (Solid State Physics).
64. *Mahan, G. D.* Many-particle physics / G. D. Mahan. — Springer Science & Business Media, 2013.
65. Electron Correlations at Metallic Densities / K. S. Singwi [и др.] // *Phys. Rev.* — 1968. — Т. 176, вып. 2. — С. 589—599.
66. *Hasegawa, T.* Electron Correlations at Metallic Densities, II. Quantum Mechanical Expression of Dielectric Function with Wigner Distribution Function / T. Hasegawa, M. Shimizu // *Journal of the Physical Society of Japan*. — 1975. — Т. 38, № 4. — С. 965—973.
67. *Tanatar, B.* Ground-state properties of quasi-one-dimensional electron systems within dynamic local-field correction: Quantum Singwi-Tosi-Land-Sjölander theory / B. Tanatar, C. Bulutay // *Phys. Rev. B*. — 1999. — Т. 59, вып. 23. — С. 15019—15026.
68. *Luther, A.* Single-particle states, Kohn anomaly, and pairing fluctuations in one dimension / A. Luther, I. Peschel // *Phys. Rev. B*. — 1974. — Т. 9, вып. 7. — С. 2911—2919.
69. *Haldane, F. D. M.* 'Luttinger liquid theory' of one-dimensional quantum fluids. I. Properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas / F. D. M. Haldane // *Journal of Physics C Solid State Physics*. — 1981. — Т. 14. — С. 2585—2609.

70. *Gindikin, Y.* Effect of short-range electron correlations in dynamic transport in a Luttinger liquid / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Т. 61, вып. 19. — С. 12766—12771.
71. *Gindikin, Y.* Deformed Wigner crystal in a one-dimensional quantum dot / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Т. 76, вып. 4. — С. 045122.
72. *Haldane, F. D. M.* Effective Harmonic-Fluid Approach to Low-Energy Properties of One-Dimensional Quantum Fluids / F. D. M. Haldane // *Phys. Rev. Lett.* — 1981. — Т. 47, вып. 25. — С. 1840—1843.
73. *Voit, J.* Charge-spin separation and the spectral properties of Luttinger liquids / J. Voit // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 1993. — Т. 5, № 44. — С. 8305—8336.
74. *Gindikin, Y.* Collective charge modes in a 1D electron liquid / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* — 2003. — Т. 18, № 1. — С. 354.
75. Signatures of interaction-induced helical gaps in nanowire quantum point contacts / S. Heedt [и др.] // *Nature Physics.* — 2017. — Т. 13, № 6. — С. 563—567.
76. Ballistic one-dimensional transport in InAs nanowires monolithically integrated on silicon / J. Gooth [и др.] // *Applied Physics Letters.* — 2017. — Т. 110, № 8. — С. 083105.
77. Ballistic Transport and Exchange Interaction in InAs Nanowire Quantum Point Contacts / S. Heedt [и др.] // *Nano Letters.* — 2016. — Т. 16, № 5. — С. 3116—3123.
78. Towards high mobility InSb nanowire devices / Önder Gül [и др.] // *Nanotechnology.* — 2015. — Т. 26, № 21. — С. 215202.
79. Quantized Conductance in an InSb Nanowire / I. van Weperen [и др.] // *Nano Letters.* — 2013. — Т. 13, № 2. — С. 387—391.
80. Spin-Charge Separation and Localization in One Dimension / O. M. Auslaender [и др.] // *Science.* — 2005. — Т. 308, № 5718. — С. 88—92.

81. *Cuniberti, G.* ac conductance of a quantum wire with electron-electron interactions / G. Cuniberti, M. Sassetti, B. Kramer // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Т. 57, вып. 3. — С. 1515—1526.
82. *Blanter, Y. M.* Interaction Constants and Dynamic Conductance of a Gated Wire / Y. M. Blanter, F. W. J. Hekking, M. Büttiker // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Т. 81, вып. 9. — С. 1925—1928.
83. *Sablikov, V. A.* Electron transport in a quantum wire with realistic Coulomb interaction / V. A. Sablikov, B. S. Shchamkhalova // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Т. 58, вып. 20. — С. 13847—13855.
84. *Sablikov, V. A.* Dynamic Transport of Interacting Electrons in a Mesoscopic Quantum Wire / V. A. Sablikov, B. S. Shchamkhalova // *Journal of Low Temperature Physics.* — 2000. — Т. 118, № 5. — С. 485—494.
85. Terahertz time-domain measurement of ballistic electron resonance in a single-walled carbon nanotube / Z. Zhong [и др.] // *Nature Nanotechnology.* — 2008. — Т. 3. — С. 201—205.
86. *Santavicca, D. F.* Terahertz resonances and bolometric response of a single-walled carbon nanotube / D. F. Santavicca, D. E. Prober // 2008 33rd International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves. — 2008. — С. 1—3.
87. *Chudow, J. D.* Terahertz Spectroscopy of Individual Single-Walled Carbon Nanotubes as a Probe of Luttinger Liquid Physics / J. D. Chudow, D. F. Santavicca, D. E. Prober // *Nano Letters.* — 2016. — Т. 16, № 8. — С. 4909—4916.
88. Multipolar Plasmonic Resonances in Silver Nanowire Antennas Imaged with a Subnanometer Electron Probe / D. Rossouw [и др.] // *Nano Letters.* — 2011. — Т. 11, № 4. — С. 1499—1504.
89. *Cohen, M.* Observing Optical Plasmons on a Single Nanometer Scale / M. Cohen, R. Shavit, Z. Zalevsky // *Scientific Reports.* — 2014. — Т. 4. — С. 4096.
90. Heat dissipation in atomic-scale junctions / W. Lee [и др.] // *Nature.* — 2013. — Т. 498, № 7453. — С. 209—212.

91. *Gindikin, Y.* Dissipative Conductance Due to Short-Range Electron Correlations in One-Dimensional Conductors / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // Physics of Low-Dimensional Structures. — 1999. — Т. 11/12. — С. 33.
92. *Gindikin, Y.* Dynamic correlations of the spinless Coulomb Luttinger liquid / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // Phys. Rev. B. — 2002. — Т. 65, ВЫП. 12. — С. 125109.
93. *Gindikin, Y.* Effect of Coulomb interaction on the spectral functions of a 1D electron liquid / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // Physics of Low-Dimensional Structures. — 2002. — Т. 9/10. — С. 71.
94. *Gindikin, Y.* A Soft Mode in a One-Dimensional Electron Liquid / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // Physics of Low-Dimensional Structures. — 2001. — Т. 11/12. — С. 179.
95. *Gindikin, Y.* Soft collective charge mode in a 1D electron system / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // 10th International Symposium on Nanostructures: Physics and Technology. Т. 5023 / под ред. Z. I. Alferov, L. Esaki. — International Society for Optics, Photonics. SPIE, 2003. — С. 264—266.
96. *Holas, A.* Dynamic local-field factor of an electron liquid in the quantum versions of the Singwi-Tosi-Land-Sjölander and Vashishta-Singwi theories / A. Holas, S. Rahman // Phys. Rev. B. — 1987. — Т. 35, ВЫП. 6. — С. 2720—2731.
97. *Moudgil, R. K.* Static and dynamic correlation functions of a two-dimensional quantum electron fluid / R. K. Moudgil, P. K. Ahluwalia, K. N. Pathak // Phys. Rev. B. — 1995. — Т. 52, ВЫП. 16. — С. 11945—11957.
98. *Calmels, L.* Exchange and correlation in the quasi-one-dimensional electron gas: The local-field correction / L. Calmels, A. Gold // Phys. Rev. B. — 1995. — Т. 52, ВЫП. 15. — С. 10841—10857.
99. *Calmels, L.* Many-body effects in the interacting quasi-one-dimensional electron gas: Oscillator confinement / L. Calmels, A. Gold // Phys. Rev. B. — 1997. — Т. 56, ВЫП. 4. — С. 1762—1779.

100. *Gold, A.* Excitation spectrum of the quasi-one-dimensional electron gas with long-range Coulomb interaction / A. Gold, L. Calmels // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Т. 58, вып. 7. — С. 3497—3500.
101. Ground-state properties and density response of quasi-one-dimensional electron systems / D. Agosti [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Т. 57, вып. 23. — С. 14869—14876.
102. *Kouwenhoven, L. P.* Few-electron quantum dots / L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, S. Tarucha // *Reports on Progress in Physics.* — 2001. — Т. 64, № 6. — С. 701—736.
103. Theory of momentum resolved tunneling into a short quantum wire / G. A. Fiete [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Т. 72, вып. 4. — С. 045315.
104. Localization transition in a ballistic quantum wire / H. Steinberg [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Т. 73, вып. 11. — С. 113307.
105. *Tarucha, S.* Reduction of quantized conductance at low temperatures observed in 2 to 10 micrometer-long quantum wires / S. Tarucha, T. Honda, T. Saku // *Solid State Communications.* — 1995. — Т. 94, № 6. — С. 413—418.
106. *Maslov, D. L.* Landauer conductance of Luttinger liquids with leads / D. L. Maslov, M. Stone // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Т. 52, вып. 8. — R5539—R5542.
107. *Wang, C.-K.* Local spin polarization in ballistic quantum point contacts / C.-K. Wang, K.-F. Berggren // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Т. 57, вып. 8. — С. 4552—4556.
108. *Rokhinson, L. P.* Spontaneous Spin Polarization in Quantum Point Contacts / L. P. Rokhinson, L. N. Pfeiffer, K. W. West // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Т. 96, вып. 15. — С. 156602.
109. Conductance Quantization at a Half-Integer Plateau in a Symmetric GaAs Quantum Wire / R. Crook [и др.] // *Science.* — 2006. — Т. 312, № 5778. — С. 1359—1362.
110. Linear conductance of quantum point contacts with deliberately broken symmetry / A. Shailos [и др.] // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2006. — Т. 18, № 5. — С. 1715—1724.

111. Nonlinear Response of a Clean One-Dimensional Wire / R. de Picciotto [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Т. 92, вып. 3. — С. 036805.
112. *Mattsson, A. E.* Properties of a Luttinger liquid with boundaries at finite temperature and size / A. E. Mattsson, S. Eggert, H. Johannesson // Phys. Rev. B. — 1997. — Т. 56, вып. 24. — С. 15615—15628.
113. *Voit, J.* Bounded Luttinger liquids as a universality class of quantum critical behavior / J. Voit, Y. Wang, M. Grioni // Phys. Rev. B. — 2000. — Т. 61, вып. 12. — С. 7930—7940.
114. *Imambekov, A.* One-dimensional quantum liquids: Beyond the Luttinger liquid paradigm / A. Imambekov, T. L. Schmidt, L. I. Glazman // Rev. Mod. Phys. — 2012. — Т. 84, вып. 3. — С. 1253—1306.
115. Gapped Phases of Quantum Wires / O. Starykh [и др.] // Low-Dimensional Systems. Т. 544 / под ред. Т. Brandes. — Springer, Berlin/Heidelberg, 2000. — С. 37—78. — (Lecture Notes in Physics).
116. *Loss, D.* Quantum computation with quantum dots / D. Loss, D. P. DiVincenzo // Phys. Rev. A. — 1998. — Т. 57, вып. 1. — С. 120—126.
117. Single-spin manipulation in a double quantum dot in the field of a micromagnet / S. Chesi [и др.] // Phys. Rev. B. — 2014. — Т. 90, вып. 23. — С. 235311.
118. Coherent Adiabatic Spin Control in the Presence of Charge Noise Using Tailored Pulses / H. Ribeiro [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2013. — Т. 110, вып. 8. — С. 086804.
119. Demonstration of Entanglement of Electrostatically Coupled Singlet-Triplet Qubits / M. D. Shulman [и др.] // Science. — 2012. — Т. 336, № 6078. — С. 202—205.
120. Exchange-based CNOT gates for singlet-triplet qubits with spin-orbit interaction / J. Klinovaja [и др.] // Phys. Rev. B. — 2012. — Т. 86, вып. 8. — С. 085423.
121. Dephasing time of GaAs electron-spin qubits coupled to a nuclear bath exceeding 200 ms / H. Bluhm [и др.] // Nature Physics. — 2010. — Т. 7. — С. 109.
122. Spin-orbit qubit in a semiconductor nanowire / S. Nadj-Perge [и др.] // Nature. — 2010. — Т. 468. — С. 1084.

123. Quantum Manipulation of Two-Electron Spin States in Isolated Double Quantum Dots / B. Bertrand [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Т. 115, вып. 9. — С. 096801.
124. N-electron ground state energies of a quantum dot in magnetic field / R. C. Ashoori [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Т. 71, вып. 4. — С. 613—616.
125. Quantum-dot ground states in a magnetic field studied by single-electron tunneling spectroscopy on double-barrier heterostructures / T. Schmidt [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Т. 51, вып. 8. — С. 5570—5573.
126. Excitation Spectra of Circular, Few-Electron Quantum Dots / L. P. Kouwenhoven [и др.] // *Science.* — 1997. — Т. 278, № 5344. — С. 1788—1792.
127. Singlet–triplet transitions in a few-electron quantum dot / W. van der Wiel [и др.] // *Physica B: Condensed Matter.* — 1998. — Т. 256—258. — С. 173—177.
128. *Sablikov, V. A.* Singlet-triplet transition in double quantum dots in two-dimensional topological insulators / V. A. Sablikov, A. A. Sukhanov // *Phys. Rev. B.* — 2018. — Т. 98, вып. 11. — С. 115423.
129. *Hawrylak, P.* Voltage-controlled coded qubit based on electron spin / P. Hawrylak, M. Korkusinski // *Solid State Communications.* — 2005. — Т. 136, № 9. — С. 508—512.
130. Voltage-tunable singlet-triplet transition in lateral quantum dots / J. Kyriakidis [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Т. 66, вып. 3. — С. 035320.
131. Cotunneling Spectroscopy in Few-Electron Quantum Dots / D. M. Zumbühl [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Т. 93, вып. 25. — С. 256801.
132. *Haug, H.* Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors / H. Haug, S. W. Koch. — 5th. — WORLD SCIENTIFIC, 2009.
133. Excitation Spectrum of Two Correlated Electrons in a Lateral Quantum Dot with Negligible Zeeman Splitting / C. Ellenberger [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Т. 96, вып. 12. — С. 126806.
134. Imaging Coherent Electron Flow from a Quantum Point Contact / M. A. Topinka [и др.] // *Science.* — 2000. — Т. 289, № 5488. — С. 2323—2326.

135. *Woodside, M. T.* Scanned Probe Imaging of Single-Electron Charge States in Nanotube Quantum Dots / M. T. Woodside, P. L. McEuen // *Science*. — 2002. — Т. 296, № 5570. — С. 1098—1101.
136. Imaging a one-electron InAs quantum dot in an InAs/InP nanowire / A. C. Bleszynski-Jayich [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Т. 77, вып. 24. — С. 245327.
137. Scanning gate imaging of quantum dots in 1D ultra-thin InAs/InP nanowires / E. E. Boyd [и др.] // *Nanotechnology*. — 2011. — Т. 22, № 18. — С. 185201.
138. *Traverso Ziani, N.* Signatures of Wigner correlations in the conductance of a one-dimensional quantum dot coupled to an AFM tip / N. Traverso Ziani, F. Cavaliere, M. Sassetti // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Т. 86, вып. 12. — С. 125451.
139. *Mantelli, D.* Non-linear Coulomb blockade microscopy of a correlated one-dimensional quantum dot / D. Mantelli, F. Cavaliere, M. Sassetti // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2012. — Т. 24, № 43. — С. 432202.
140. Investigations of local electronic transport in InAs nanowires by scanning gate microscopy at liquid helium temperatures / A. Zhukov [и др.] // *JETP Letters*. — 2014. — Т. 100, № 1. — С. 32—38.
141. Formation of quantum dots in the potential fluctuations of InGaAs heterostructures probed by scanning gate microscopy / P. Liu [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2015. — Т. 91, вып. 7. — С. 075313.
142. *Qian, J.* Imaging and manipulating electrons in a one-dimensional quantum dot with Coulomb blockade microscopy / J. Qian, B. I. Halperin, E. J. Heller // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Т. 81, вып. 12. — С. 125323.
143. *Golub, G. H.* Matrix Computations (3rd Ed.) / G. H. Golub, C. F. Van Loan. — Baltimore, MD, USA : Johns Hopkins University Press, 1996.
144. *Slater, J. C.* The Theory of Complex Spectra / J. C. Slater // *Phys. Rev.* — 1929. — Т. 34, вып. 10. — С. 1293—1322.
145. *Condon, E. U.* The Theory of Complex Spectra / E. U. Condon // *Phys. Rev.* — 1930. — Т. 36, вып. 7. — С. 1121—1133.

146. *Slater, J. C.* Molecular Energy Levels and Valence Bonds / J. C. Slater // Phys. Rev. — 1931. — Т. 38, вып. 6. — С. 1109—1144.
147. *Löwdin, P.-O.* Quantum Theory of Many-Particle Systems. I. Physical Interpretations by Means of Density Matrices, Natural Spin-Orbitals, and Convergence Problems in the Method of Configurational Interaction / P.-O. Löwdin // Phys. Rev. — 1955. — Т. 97, вып. 6. — С. 1474—1489.
148. *Gindikin, Y.* A strongly correlated electron state at one-dimensional quantum points / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // Journal of Communications Technology and Electronics. — 2007. — Т. 52, вып. 6. — С. 684.
149. Direct Measurement of the Spin-Orbit Interaction in a Two-Electron InAs Nanowire Quantum Dot / C. Fasth [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Т. 98, вып. 26. — С. 266801.
150. *Wunsch, B.* Few-electron physics in a nanotube quantum dot with spin-orbit coupling / B. Wunsch // Phys. Rev. B. — 2009. — Т. 79, вып. 23. — С. 235408.
151. *Romano, C.* Spin-orbit effects on two-electron states in nanowhisker double quantum dots / C. Romano, P. Tamborenea, S. Ulloa // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2009. — Т. 41, № 8. — С. 1577—1582.
152. *Gindikin, Y.* Electron-electron interaction effect on the singlet-triplet transitions in one-dimensional quantum dots / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2011. — Т. 23, № 17. — С. 175601.
153. *Liu, Y.* Electronic structure of two-electron systems with the short-range repulsive interaction / Y. Liu, B.-G. Liu // Physics Letters A. — 2003. — Т. 308, № 4. — С. 308—311.
154. Density-functional theory of strongly correlated Fermi gases in elongated harmonic traps / G. Xianlong [и др.] // Phys. Rev. A. — 2006. — Т. 73, вып. 3. — С. 033609.
155. Observation of a one-dimensional spin-orbit gap in a quantum wire / C. H. L. Quay [и др.] // Nature Physics. — 2010. — Т. 6. — С. 336.

156. *Gindikin, Y.* Probe-assisted spin manipulation in one-dimensional quantum dots / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Phys. Status Solidi RRL*. — 2015. — Т. 9, № 6. — С. 366—370.
157. *Häusler, W.* Interacting electrons in a one-dimensional quantum dot / W. Häusler, B. Kramer // *Phys. Rev. B*. — 1993. — Т. 47, вып. 24. — С. 16353—16357.
158. *Martienssen, W.* Springer handbook of condensed matter and materials data / W. Martienssen, H. Warlimont. — Springer, 2005.
159. *Zielke, R.* Anisotropic g factor in InAs self-assembled quantum dots / R. Zielke, F. Maier, D. Loss // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Т. 89, вып. 11. — С. 115438.
160. Nuclear spin effects in semiconductor quantum dots / E. A. Chekhovich [и др.] // *Nature Materials*. — 2013. — Т. 12. — С. 494.
161. *Breit, G.* The Effect of Retardation on the Interaction of Two Electrons / G. Breit // *Phys. Rev.* — 1929. — Т. 34, вып. 4. — С. 553—573.
162. *Breit, G.* The Fine Structure of HE as a Test of the Spin Interactions of Two Electrons / G. Breit // *Phys. Rev.* — 1930. — Т. 36, вып. 3. — С. 383—397.
163. *Breit, G.* Dirac's Equation and the Spin-Spin Interactions of Two Electrons / G. Breit // *Phys. Rev.* — 1932. — Т. 39, вып. 4. — С. 616—624.
164. *Dresselhaus, G.* Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures / G. Dresselhaus // *Phys. Rev.* — 1955. — Т. 100, вып. 2. — С. 580—586.
165. *Rashba, E. I.* Symmetry of Energy Bands in Crystals of Wurtzite Type II. Symmetry of Bands with Spin-Orbit Interaction Included / E. I. Rashba, V. I. Sheka // *Fiz. Tverd. Tela: Collected Papers*. — 1959. — Т. 2. — С. 162.
166. *Bir, G.* Symmetry and strain-induced effects in semiconductors / G. Bir, G. Pikus. — Wiley, New York, 1974.
167. *Voon, L. C. L. Y.* The  $k \cdot p$  method: electronic properties of semiconductors / L. C. L. Y. Voon, M. Willatzen. — Springer Science & Business Media, 2009.

168. *Gindikin, Y.* Image-potential-induced spin-orbit interaction in one-dimensional electron systems / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Phys. Rev. B.* — 2017. — T. 95, вып. 4. — С. 045138.
169. *Gindikin, Y.* Dynamic Transport in a Quantum Wire Driven by Spin–Orbit Interaction / Y. Gindikin // *Phys. Status Solidi RRL.* — 2017. — T. 11, № 12. — С. 1700256.
170. *Gindikin, Y.* Dynamics of one-dimensional electrons with broken spin-charge separation / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Phys. Status Solidi RRL.* — 2018. — T. 12, № 1. — С. 1700313.
171. *Gindikin, Y.* The spin-orbit mechanism of electron pairing in quantum wires / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Phys. Status Solidi RRL.* — 2018. — T. 12. — С. 1800209.
172. *Gindikin, Y.* Spin-orbit-driven electron pairing in two dimensions / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Phys. Rev. B.* — 2018. — T. 98, вып. 11. — С. 115137.
173. *Gindikin, Y.* Coulomb pairing of electrons in thin films with strong spin-orbit interaction / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* — 2019. — T. 108. — С. 187.
174. *Gindikin, Y.* Bound Electron Pairs Formed by the Spin–Orbit Interaction in 2D Gated Structures / Y. Gindikin, V. Vigdorichik, V. A. Sablikov // *Phys. Status Solidi RRL.* — 2020. — T. 14. — С. 1900600.
175. *Gindikin, Y.* Pair spin-orbit interaction in low-dimensional electron systems / Y. Gindikin, V. A. Sablikov // *The European Physical Journal Special Topics.* — 2020. — T. 229, № 4. — С. 503.
176. *Maiani, L.* Relativistic quantum mechanics: an introduction to relativistic quantum fields / L. Maiani, O. Benhar. — CRC Press, Boca Raton, 2016.
177. *Greiner, W.* Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations / W. Greiner. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2000.
178. *Strange, P.* Relativistic Quantum Mechanics: With Applications in Condensed Matter and Atomic Physics / P. Strange. — Cambridge University Press, 1998.

179. The physics of fullerene-based and fullerene-related materials. Т. 23 / M. S. Dresselhaus [и др.] ; под ред. W. Andreoni. — Springer, Dordrecht, 2000. — (Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimensional Structures).
180. *Geim, A. K.* The rise of graphene / A. K. Geim, K. S. Novoselov // Nature Materials. — 2007. — Т. 6. — С. 183.
181. *Semenoff, G. W.* Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly / G. W. Semenoff // Phys. Rev. Lett. — 1984. — Т. 53, вып. 26. — С. 2449—2452.
182. *Haldane, F. D. M.* Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly" / F. D. M. Haldane // Phys. Rev. Lett. — 1988. — Т. 61, вып. 18. — С. 2015—2018.
183. *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. — Т. 314, № 5806. — С. 1757—1761.
184. *Weyl, H.* Gravitation and the electron / H. Weyl // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 1929. — Т. 15, № 4. — С. 323—334.
185. *Armitage, N. P.* Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids / N. P. Armitage, E. J. Mele, A. Vishwanath // Rev. Mod. Phys. — 2018. — Т. 90, вып. 1. — С. 015001.
186. *Burkov, A. A.* Chiral anomaly and transport in Weyl metals / A. A. Burkov // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2015. — Т. 27, № 11. — С. 113201.
187. *Stander, N.* Evidence for Klein Tunneling in Graphene  $p$ - $n$  Junctions / N. Stander, B. Huard, D. Goldhaber-Gordon // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Т. 102, вып. 2. — С. 026807.
188. Observing Atomic Collapse Resonances in Artificial Nuclei on Graphene / Y. Wang [и др.] // Science. — 2013. — Т. 340, № 6133. — С. 734—737.
189. *Dirac, P. A. M.* The quantum theory of the electron / P. A. M. Dirac // Proc. R. Soc. Lond. A. — 1928. — Т. 117, № 778. — С. 610—624.

190. *Pauli, W.* General Principles of Quantum Mechanics / W. Pauli. — Springer-Verlag, Berlin, 1980.
191. *Glazov, M. M.* Electron & nuclear spin dynamics in semiconductor nanostructures. T. 23 / M. M. Glazov. — Oxford University Press, 2018. — (Series on Semiconductor Science and Technology).
192. *Bychkov, Y. A.* Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy / Y. A. Bychkov, E. I. Rashba // JETP Lett. — 1984. — T. 39, № 2. — С. 78.
193. *Smit, J.* The spontaneous hall effect in ferromagnetics II / J. Smit // Physica. — 1958. — T. 24, № 1. — С. 39—51.
194. *Dyakonov, M. I.* Possibility of orienting electron spins with current / M. I. Dyakonov, V. I. Perel // ZhETF Pis. Red. — 1971. — T. 13. — С. 657—660.
195. *Berger, L.* Side-Jump Mechanism for the Hall Effect of Ferromagnets / L. Berger // Phys. Rev. B. — 1970. — Т. 2, вып. 11. — С. 4559—4566.
196. *Nozières, P.* A simple theory of the anomalous hall effect in semiconductors / P. Nozières, C. Lewiner // Journale de Physique. — 1973. — Т. 34. — С. 901.
197. *Crépieux, A.* Theory of the anomalous Hall effect from the Kubo formula and the Dirac equation / A. Crépieux, P. Bruno // Phys. Rev. B. — 2001. — Т. 64, вып. 1. — С. 014416.
198. *Engel, H.-A.* Theory of Spin Hall Conductivity in *n*-Doped GaAs / H.-A. Engel, B. I. Halperin, E. I. Rashba // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Т. 95, вып. 16. — С. 166605.
199. *Majorana, E.* Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone / E. Majorana // Il Nuovo Cimento. — 1937. — Т. 14. — С. 171.
200. *Elliott, S. R.* Colloquium: Majorana fermions in nuclear, particle, and solid-state physics / S. R. Elliott, M. Franz // Rev. Mod. Phys. — 2015. — Т. 87, вып. 1. — С. 137—163.
201. *Beenakker, C.* Search for Majorana Fermions in Superconductors / C. Beenakker // Annual Review of Condensed Matter Physics. — 2013. — Т. 4, № 1. — С. 113—136.

202. *Alicea, J.* New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems / J. Alicea // Reports on Progress in Physics. — 2012. — Т. 75, № 7. — С. 076501.
203. *Stanescu, T. D.* Majorana fermions in semiconductor nanowires: fundamentals, modeling, and experiment / T. D. Stanescu, S. Tewari // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2013. — Т. 25, № 23. — С. 233201.
204. *Kitaev, A. Y.* Fault-tolerant quantum computation by anyons / A. Y. Kitaev // Annals of Physics. — 2003. — Т. 303, № 1. — С. 2–30.
205. Non-Abelian statistics and topological quantum information processing in 1D wire networks / J. Alicea [и др.] // Nature Physics. — 2011. — Т. 7, № 5. — С. 412–417.
206. *Kane, E. O.* Band structure of indium antimonide / E. O. Kane // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1957. — Т. 1, № 4. — С. 249–261.
207. *McLaughlan, J. R.* Spin-orbit splitting of image states / J. R. McLaughlan, E. M. Llewellyn-Samuel, S. Crampin // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2004. — Т. 16, № 39. — С. 6841.
208. Rashba splitting in an image potential state investigated by circular dichroism two-photon photoemission spectroscopy / T. Nakazawa [и др.] // Phys. Rev. B. — 2016. — Т. 94, вып. 11. — С. 115412.
209. Rashba Spin-Orbit Coupling in Image Potential States / S. Tognolini [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2015. — Т. 115, вып. 4. — С. 046801.
210. Spin-current generation from Coulomb-Rashba interaction in semiconductor bilayers / M. M. Glazov [и др.] // Phys. Rev. B. — 2011. — Т. 84, вып. 3. — С. 033305.
211. *Zawadzki, W.* Zitterbewegung (trembling motion) of electrons in semiconductors: a review / W. Zawadzki, T. M. Rusin // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2011. — Т. 23, № 14. — С. 143201.
212. *Escribano, S. D.* Improved effective equation for the Rashba spin-orbit coupling in semiconductor nanowires / S. D. Escribano, A. L. Yeyati, E. Prada // Phys. Rev. Research. — 2020. — Август. — Т. 2, вып. 3. — С. 033264.

213. *Shankar, R.* Principles of Quantum Mechanics / R. Shankar. — Springer US, 1994.
214. *Keldysh, L.* Coulomb interaction in thin semiconductor and semimetal films / L. Keldysh // Sov. Phys. JETP. — 1979. — Т. 29. — С. 658.
215. Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides / G. Wang [и др.] // Rev. Mod. Phys. — 2018. — Т. 90, вып. 2. — С. 021001.
216. *Rytova, N.* Screened potential of a point charge in a thin film / N. Rytova // Moscow University Physics Bulletin. — 1967. — Т. 3. — С. 30.
217. Freely suspended quantum point contacts / C. Rössler [и др.] // Solid State Communications. — 2010. — Т. 150, № 17. — С. 861–864.
218. Lateral-electric-field-induced spin polarization in a suspended GaAs quantum point contact / D. A. Pokhobov [и др.] // Applied Physics Letters. — 2018. — Т. 112, № 8. — С. 082102.
219. Double-Channel Electron Transport in Suspended Quantum Point Contacts with in-Plane Side Gates / D. Pokhobov [и др.] // Semiconductors. — 2020. — Т. 54, № 12. — С. 1605–1610.
220. *Allami, H.* Superfluid-insulator transition and the BEC-BCS crossover in the Rashba moat band / H. Allami, O. A. Starykh, D. A. Pesin // Phys. Rev. B. — 2019. — Т. 99, вып. 10. — С. 104505.
221. NIST Handbook of Mathematical Functions / F. W. J. Olver [и др.]. — Cambridge University Press, 2010.
222. *Cudazzo, P.* Dielectric screening in two-dimensional insulators: Implications for excitonic and impurity states in graphane / P. Cudazzo, I. V. Tokatly, A. Rubio // Phys. Rev. B. — 2011. — Т. 84, вып. 8. — С. 085406.
223. *Mikhailov, S. A.* Equations of macroscopic electrodynamics for two-dimensional crystals / S. A. Mikhailov // APL Photonics. — 2019. — Т. 4, № 3. — С. 034501.

224. *Berkelbach, T. C.* Theory of neutral and charged excitons in monolayer transition metal dichalcogenides / T. C. Berkelbach, M. S. Hybertsen, D. R. Reichman // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Т. 88, вып. 4. — С. 045318.
225. *Kezerashvili, R. Y.* Few-Body Systems in Condensed Matter Physics / R. Y. Kezerashvili // *Few-Body Systems.* — 2019. — Т. 60, № 3. — С. 52.
226. *Simon, B.* The bound state of weakly coupled Schrödinger operators in one and two dimensions / B. Simon // *Annals of Physics.* — 1976. — Т. 97, № 2. — С. 279—288.
227. *Landau, L. D.* Course of Theoretical Physics, Vol. 3, Quantum Mechanics / L. D. Landau, E. M. Lifshitz. — Pergamon Press, 1958.
228. Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory / X. L. Yang [и др.] // *Phys. Rev. A.* — 1991. — Т. 43, вып. 3. — С. 1186—1196.
229. *Frank, W. M.* Singular Potentials / W. M. Frank, D. J. Land, R. M. Spector // *Rev. Mod. Phys.* — 1971. — Т. 43, вып. 1. — С. 36—98.
230. *Efimov, V. N.* Weakly-bound states of 3 resonantly-interacting particles / V. N. Efimov // *Sov. J. Nucl. Phys.* — 1971. — Т. 12. — С. 589.
231. *Lévy-Leblond, J.-M.* Electron Capture by Polar Molecules / J.-M. Lévy-Leblond // *Phys. Rev.* — 1967. — Т. 153, вып. 1. — С. 1—4.
232. *Denschlag, J.* Probing a Singular Potential with Cold Atoms: A Neutral Atom and a Charged Wire / J. Denschlag, G. Umshaus, J. Schmiedmayer // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Т. 81, вып. 4. — С. 737—741.
233. *Case, K. M.* Singular Potentials / K. M. Case // *Phys. Rev.* — 1950. — Т. 80, вып. 5. — С. 797—806.
234. *Zeldovich, Y. B.* Electronic structure of superheavy atoms / Y. B. Zeldovich, V. S. Popov // *Soviet Physics Uspekhi.* — 1972. — Т. 14, № 6. — С. 673.
235. *Fogler, M. M.* Screening of a hypercritical charge in graphene / M. M. Fogler, D. S. Novikov, B. I. Shklovskii // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Т. 76, вып. 23. — С. 233402.

236. Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives / V. N. Kotov [и др.] // *Rev. Mod. Phys.* — 2012. — Т. 84, вып. 3. — С. 1067—1125.
237. *Meetz, K.* Singular potentials in nonrelativistic quantum mechanics / K. Meetz // *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*. — 1964. — Т. 34, № 3. — С. 690—708.
238. Renormalization of the Inverse Square Potential / H. E. Camblong [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Т. 85, вып. 8. — С. 1590—1593.
239. Singular potentials and limit cycles / S. R. Beane [и др.] // *Phys. Rev. A.* — 2001. — Т. 64, вып. 4. — С. 042103.
240. *Bouaziz, D.* Regularization of the singular inverse square potential in quantum mechanics with a minimal length / D. Bouaziz, M. Bawin // *Phys. Rev. A.* — 2007. — Т. 76, вып. 3. — С. 032112.
241. *Gupta, K. S.* Renormalization in quantum mechanics / K. S. Gupta, S. G. Rajeev // *Phys. Rev. D.* — 1993. — Т. 48, вып. 12. — С. 5940—5945.
242. *Simon, B.* Sturm oscillation and comparison theorems / B. Simon // *Sturm-Liouville Theory*. — Birkhäuser Basel, 2005. — С. 29—43.
243. *Daboul, J.* Quantum bound states with zero binding energy / J. Daboul, M. M. Nieto // *Physics Letters A.* — 1994. — Т. 190, № 5. — С. 357—362.
244. *Sablikov, V. A.* Two-body problem for two-dimensional electrons in the Bernervig-Hughes-Zhang model / V. A. Sablikov // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Т. 95, вып. 8. — С. 085417.
245. Exfoliation of single layer BiTeI flakes / B. Fülöp [и др.] // *2D Materials*. — 2018. — Т. 5, № 3. — С. 031013.
246. *Bender, C. M.* Multiple-scale analysis of quantum systems / C. M. Bender, L. M. A. Bettencourt // *Phys. Rev. D.* — 1996. — Дек. — Т. 54, вып. 12. — С. 7710—7723.

247. *Bender, C. M.* Advanced mathematical methods for scientists and engineers I: Asymptotic methods and perturbation theory / C. M. Bender, S. A. Orszag. — Springer Science & Business Media, 1999.
248. Approaching Quantization in Macroscopic Quantum Spin Hall Devices through Gate Training / L. Lunczer [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2019. — Июль. — Т. 123, вып. 4. — С. 047701.
249. Failure of Conductance Quantization in Two-Dimensional Topological Insulators due to Nonmagnetic Impurities / P. Novelli [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2019. — ЯНВ. — Т. 122, вып. 1. — С. 016601.
250. *Biswas, R. R.* Impurity-induced states on the surface of three-dimensional topological insulators / R. R. Biswas, A. V. Balatsky // *Phys. Rev. B.* — 2010. — ИЮНЬ. — Т. 81, вып. 23. — С. 233405.
251. *Black-Schaffer, A. M.* Strong potential impurities on the surface of a topological insulator / A. M. Black-Schaffer, A. V. Balatsky // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Март. — Т. 85, вып. 12. — С. 121103.
252. *Sablikov, V. A.* Electronic states induced by nonmagnetic defects in two-dimensional topological insulators / V. A. Sablikov, A. A. Sukhanov // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Февр. — Т. 91, вып. 7. — С. 075412.
253. Defect engineering of two-dimensional transition metal dichalcogenides / Z. Lin [и др.] // *2D Materials.* — 2016. — Т. 3, № 2. — С. 022002.
254. Extrinsic Spin Hall Effect Induced by Iridium Impurities in Copper / Y. Niimi [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Март. — Т. 106, вып. 12. — С. 126601.
255. Extrinsic spin Hall effect from anisotropic Rashba spin-orbit coupling in graphene / H.-Y. Yang [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Февр. — Т. 93, вып. 8. — С. 085418.
256. *Gindikina, Y.* The Coulomb impurity in 2D materials with strong spin-orbit interaction / Y. Gindikina, V. A. Sablikov // *Phys. Status Solidi B.* — 2021. — Т. 258. — С. 2000501.
257. Fingerprint of different spin-orbit terms for spin transport in HgTe quantum wells / D. G. Rothe [и др.] // *New Journal of Physics.* — 2010. — Т. 12, № 6. — С. 065012.

258. Inversion asymmetry potential tuning of topological insulator dots with impurities / G. Li [и др.] // Journal of Applied Physics. — 2018. — Т. 124, № 16. — С. 164301.
259. Two-dimensional pnictogens: A review of recent progresses and future research directions / F. Ersan [и др.] // Applied Physics Reviews. — 2019. — Т. 6, № 2. — С. 021308.
260. *Häusler, W.* Rashba precession in quantum wires with interaction / W. Häusler // Phys. Rev. B. — 2001. — Т. 63, вып. 12. — С. 121310.
261. *Moroz, A. V.* Theory of quasi-one-dimensional electron liquids with spin-orbit coupling / A. V. Moroz, K. V. Samokhin, C. H. W. Barnes // Phys. Rev. B. — 2000. — Т. 62, вып. 24. — С. 16900—16911.
262. *Bulgakov, E. N.* Spin rotation for ballistic electron transmission induced by spin-orbit interaction / E. N. Bulgakov, A. F. Sadreev // Phys. Rev. B. — 2002. — Т. 66, вып. 7. — С. 075331.
263. *Governale, M.* Spin accumulation in quantum wires with strong Rashba spin-orbit coupling / M. Governale, U. Zülicke // Phys. Rev. B. — 2002. — Т. 66, вып. 7. — С. 073311.
264. *Debald, S.* Rashba effect and magnetic field in semiconductor quantum wires / S. Debald, B. Kramer // Phys. Rev. B. — 2005. — Март. — Т. 71, вып. 11. — С. 115322.
265. *Sun, J.* Spin-Orbit-Induced Spin-Density Wave in a Quantum Wire / J. Sun, S. Gangadharaiah, O. A. Starykh // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Март. — Т. 98, вып. 12. — С. 126408.
266. Spin-selective Peierls transition in interacting one-dimensional conductors with spin-orbit interaction / B. Braunecker [и др.] // Phys. Rev. B. — 2010. — Т. 82, вып. 4. — С. 045127.
267. *Tretiakov, O. A.* Spin resonance in a Luttinger liquid with spin-orbit interaction / O. A. Tretiakov, K. S. Tikhonov, V. L. Pokrovsky // Phys. Rev. B. — 2013. — Т. 88, вып. 12. — С. 125143.

268. *Sun, C.* Spin correlations in quantum wires / C. Sun, V. L. Pokrovsky // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Т. 91, вып. 16. — С. 161305.
269. *Klimontovich, I. L.* On the Method of “Second Quantization” in Phase Space / I. L. Klimontovich // *Soviet Physics JETP.* — 1958. — Т. 6, № 4. — С. 753.
270. *Bonitz, M.* Quantum kinetic theory / M. Bonitz. — Springer, 2016.
271. *Li, C.* Tuning of plasmon propagation in two-dimensional electrons / C. Li, X. G. Wu // *Applied Physics Letters.* — 2008. — Т. 93, № 25. — С. 251501.
272. *Delft, J. von.* Bosonization for beginners — refermionization for experts / J. von Delft, H. Schoeller // *Annalen der Physik.* — 1998. — Т. 7, № 4. — С. 225—305.
273. *Tiablikov, S. V.* Methods in the quantum theory of magnetism / S. V. Tiablikov. — Springer, 2013.
274. *Avery, J.* Creation and annihilation operators / J. Avery. — McGraw-Hill Companies, 1976.
275. Time-resolved pure spin fractionalization and spin-charge separation in helical Luttinger liquid based devices / A. Calzona [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Т. 92, вып. 19. — С. 195414.
276. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells / M. König [и др.] // *Science.* — 2007. — Т. 318, № 5851. — С. 766—770.
277. The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment / M. König [и др.] // *Journal of the Physical Society of Japan.* — 2008. — Т. 77, № 3. — С. 031007.
278. Helical edge and surface states in HgTe quantum wells and bulk insulators / X. Dai [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Т. 77, вып. 12. — С. 125319.
279. Inelastic Electron Backscattering in a Generic Helical Edge Channel / T. L. Schmidt [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Т. 108, вып. 15. — С. 156402.
280. *Rod, A.* Spin texture of generic helical edge states / A. Rod, T. L. Schmidt, S. Rachel // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Т. 91, вып. 24. — С. 245112.

281. Separation of neutral and charge modes in one-dimensional chiral edge channels / E. Bocquillon [и др.] // Nature communications. — 2013. — Т. 4. — С. 1839.
282. Probing Spin-Charge Separation in a Tomonaga-Luttinger Liquid / Y. Jompol [и др.] // Science. — 2009. — Т. 325, № 5940. — С. 597—601.
283. *Ulbricht, T.* Is spin-charge separation observable in a transport experiment? / T. Ulbricht, P. Schmitteckert // EPL. — 2009. — Т. 86, № 5. — С. 57006.
284. *Safi, I.* Transport in an inhomogeneous interacting one-dimensional system / I. Safi, H. J. Schulz // Phys. Rev. B. — 1995. — Т. 52, вып. 24. — R17040—R17043.
285. *Shockley, W.* Currents to Conductors Induced by a Moving Point Charge / W. Shockley // Journal of Applied Physics. — 1938. — Т. 9, № 10. — С. 635—636.
286. Logic Circuits with Carbon Nanotube Transistors / A. Bachtold [и др.] // Science. — 2001. — Т. 294, № 5545. — С. 1317—1320.
287. Wigner-function formalism applied to semiconductor quantum devices: Failure of the conventional boundary condition scheme / R. Rosati [и др.] // Phys. Rev. B. — 2013. — Июль. — Т. 88, вып. 3. — С. 035401.
288. *Kronig, R.* Zur neutrinotheorie des lichtetes III / R. Kronig // Physica. — 1935. — Т. 2, № 1. — С. 968—980.
289. *Mikhailov, S. A.* Ferroelectric instability of two-dimensional crystals / S. A. Mikhailov // Phys. Rev. B. — 2013. — Т. 88, вып. 19. — С. 195410.
290. *Ferreira, E. M.* Zeros of the Macdonald function of complex order / E. M. Ferreira, J. Sesma // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 2008. — Т. 211, № 2. — С. 223—231.
291. *Gosper, R. W.* Decision procedure for indefinite hypergeometric summation / R. W. Gosper // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. — 1978. — Янв. — Т. 75, № 1. — С. 40—42.

## Приложение А

### Метод бозонизации

Для полноты изложения в этом разделе представлены технические детали метода бозонизации и модели Латтинджера, которая точно решается с его помощью [26—28].

Базисом в латтинджерской модели служат невзаимодействующие электроны, спектр которых линеаризуется вблизи ферми-поверхности и неограниченно продляется до бесконечности. Движущиеся вправо электроны обозначают индексом  $r = +1$ , влево — индексом  $r = -1$ , и называют  $r$ -фермионами. Реальной электронной системе соответствует часть  $r$ -фермионного спектра с энергией  $\varepsilon > 0$ . Предполагается, что в низкоэнергетическом пределе эта модель дает асимптотически точный результат, поскольку глубоко лежащие (позитронные) состояния при этом не возбуждаются.

Бозонизация — это представление гамильтониана системы и ее фермионных операторов в терминах бозонных операторов, описывающих волны заряда, сформированные множественными электрон-дырочными парами.

Преимущество бозонизации перед точно решаемыми решеточными моделями, такими как модель Хаббарда, состоит в том, что она дает аналитический способ нахождения любых корреляционных функций одномерных систем.

В основе бозонизации лежит тот факт, что оператор плотности  $r$ -фермионов удовлетворяет бозонному коммутационному соотношению. Детали построения формализма чувствительны к граничным условиям, наложенным на систему. Мы отдельно рассмотрим случаи системы с периодическими граничными условиями (замкнутой в кольцо) и с нулевыми граничными условиями (система в боксе).

## A.1 Бозонизация на кольце

Начнем с рассмотрения бесспинового случая. Введем оператор плотности  $r$ -фермионов

$$\rho_r(p) = \sum_k : c_{r,k+p}^+ c_{r,k} : = \sum_k (c_{r,k+p}^+ c_{r,k} - \delta_{p,0} \langle c_{r,k}^+ c_{r,k} \rangle_0), \quad (\text{A.1})$$

где  $c_{r,k}$  описывает фермион с импульсом  $k$  на ветви  $r = \pm 1$  спектра  $\varepsilon_r(k) = v_F(rk - k_F)$ , линеаризованного вблизи ферми-поверхности  $\pm k_F$ . Нормальное упорядочение  $: :$  исключает расходимости, присущие системам с бесконечной плотностью частиц. Оператор плотности удовлетворяет, с точностью до константы, бозонному коммутационному соотношению

$$[\rho_r(p), \rho_{r'}(-p')] = -\delta_{r,r'} \delta_{p,p'} \frac{rpL}{2\pi}, \quad (\text{A.2})$$

где  $L$  — длина системы.

Фоковское пространство состояний 1D системы не исчерпывается бозонными возбуждениями над основным состоянием с фиксированным числом частиц. Иными словами, алгебра бозонных операторов  $\rho_r(p \neq 0)$  неполна. Ее необходимо дополнить лестничным фермионным оператором  $F_r$ , который изменяет полное число частиц  $N_r \equiv \rho_r(p = 0)$  на данной ветви спектра, не создавая бозонных возбуждений. Окончательно, оператор плотности имеет вид

$$\rho_r(p) = N_r \delta_{p,0} + \left( \frac{L|p|}{2\pi} \right)^{1/2} [\theta(rp) a_p^+ + \theta(-rp) a_{-p}], \quad (\text{A.3})$$

где  $a_p$  — бозонные операторы.

Полевой  $r$ -фермионный оператор  $\Psi_r(x)$  в представлении бозонизации равен

$$\Psi_r(x) = \frac{e^{ir(k_F - \pi/L)x}}{\sqrt{2\pi\epsilon}} F_r \exp(-i[r\phi(x) - \theta(x)]), \quad (\text{A.4})$$

где  $\epsilon \rightarrow 0$  — параметр ультрафиолетового обрезания, а канонически сопряженные бозонные фазы  $\phi$  и  $\theta$  суть

$$\phi(x) = -\frac{i\pi}{L} \sum_{p \neq 0} \frac{e^{-\alpha|p|/2 - ipx}}{p} [\rho_+(p) + \rho_-(p)] - (N_+ + N_-) \frac{\pi x}{L}, \quad (\text{A.5})$$

и

$$\theta(x) = \frac{i\pi}{L} \sum_{p \neq 0} \frac{e^{-\alpha|p|/2 - ipx}}{p} [\rho_+(p) - \rho_-(p)] + (N_+ - N_-) \frac{\pi x}{L}. \quad (\text{A.6})$$

Они удовлетворяют каноническому коммутационному соотношению,

$$[\phi(x), \theta(x')] = i \frac{\pi}{2} \text{sign}(x' - x). \quad (\text{A.7})$$

Электронный полевой оператор нелокально связан с  $r$ -фермионным,

$$\Psi^+(x) = \frac{1}{2\pi i} \sum_r \int_{-L/2}^{L/2} dy \frac{\pi}{L} \text{ctg}\left(\frac{\pi y}{L}\right) \Psi_r^+(x + y). \quad (\text{A.8})$$

Это точное соотношение обычно аппроксимируется как

$$\Psi(x) \approx \Psi_-(x) + \Psi_+(x), \quad (\text{A.9})$$

что приводит к следующей формуле для оператора электронной плотности,

$$\rho(x) = -\frac{\partial_x \phi}{\pi} + \frac{k_F}{\pi} \cos(2k_F x - 2\phi). \quad (\text{A.10})$$

Гамильтониан латтинджеровой модели равен

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_4, \quad (\text{A.11})$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{r,k} v_F(rk - k_F) : c_{rk}^+ c_{rk} : , \quad (\text{A.12})$$

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{L} \sum_p g_2(p) \rho_+(p) \rho_-(-p), \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{H}_4 = \frac{1}{2L} \sum_{r,p} g_4(p) : \rho_r(p) \rho_r(-p) : . \quad (\text{A.14})$$

Здесь  $\mathcal{H}_0$  — оператор кинетической энергии,  $\mathcal{H}_2$  — оператор взаимодействия флуктуаций плотности между различными ветвями спектра, а  $\mathcal{H}_4$  — в пределах одной ветви. Функции  $g_2(p)$  и  $g_4(p)$  суть фурье-компоненты соответствующего потенциала взаимодействия. В силу теоремы Кронига [288], кинетическая энергия равна

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\pi v_F}{L} \sum_{r,p \neq 0} : \rho_r(p) \rho_r(-p) : + \frac{\pi}{2L} [v_F(N_+ + N_-)^2 + v_F(N_+ - N_-)^2]. \quad (\text{A.15})$$

Гамильтониан (A.11) диагонализуеться преобразованием Боголюбова

$$\tilde{\mathcal{H}} = e^{iS} \mathcal{H} e^{-iS}, \quad \tilde{\rho}_r(p) = e^{iS} \rho_r(p) e^{-iS}, \quad (\text{A.16})$$

где

$$\mathcal{S} = \frac{2\pi i}{L} \sum_{p>0} \frac{\xi(p)}{p} [\rho_+(p)\rho_-(-p) - \rho_-(p)\rho_+(-p)], \quad (\text{A.17})$$

а функция  $\xi(p)$  равна

$$e^{2\xi(p)} = \sqrt{\frac{2\pi v_F + g_4(p) - g_2(p)}{2\pi v_F + g_4(p) + g_2(p)}} \equiv g(p). \quad (\text{A.18})$$

Для случая электрон-электронного отталкивания параметр взаимодействия  $g(p) < 1$ , причем сильное взаимодействие соответствует малому значению этого параметра.

Диагонализированный гамильтониан равен

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{\pi}{L} \sum_{rp \neq 0} v(p) : \tilde{\rho}_r(p)\tilde{\rho}_r(-p) : + \frac{\pi}{2L} [v_N(N_+ + N_-)^2 + v_J(N_+ - N_-)^2], \quad (\text{A.19})$$

где скорость бозонных возбуждений равна

$$v(p) = \sqrt{\left[ v_F + \frac{g_4(p)}{2\pi} \right]^2 - \left[ \frac{g_2(p)}{2\pi} \right]^2}, \quad (\text{A.20})$$

а скорости нулевых мод суть  $v_N = v(0)/g(0)$  и  $v_J = v(0)g(0)$ .

Скорость бозонных возбуждений связана с их энергией  $\omega(p)$  соотношением  $\omega(p) = |p|v(p)$ . При короткодействующем, т.е. сильно экранированном взаимодействии электронов, потенциал их взаимодействия  $U(r) = U_0\delta(r)$ , а параметр взаимодействия  $g(p) = \text{const}$ . В случае кулоновского межэлектронного взаимодействия, потенциал взаимодействия равен  $U(r) \approx e^2/\sqrt{r^2 + d^2}$ , где  $d$  — диаметр квантового провода. При этом закон дисперсии бозонных возбуждений в длинноволновом пределе  $|pd| \ll 1$  есть

$$\omega(p) \approx \beta^{-1}|p|\sqrt{|\ln |pd||}, \quad (\text{A.21})$$

где  $\beta = [\pi\hbar v_F/2e^2]^{1/2}$ . Соответственно, параметр взаимодействия равен  $g(p) = \beta|\ln |pd||^{-1/2}$ .

## А.2 Бозонизация в боксе

Изложенный выше подход необходимо модифицировать для случая нулевых граничных условий [45; 71]. Выразим полевой оператор

$$\psi(x) = \sum c_q \psi_q(x), \quad (\text{A.22})$$

где  $\psi_q(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi q x}{L}$  суть собственные функции оператора кинетической энергии в боксе, через полевые операторы  $r$ -фермионов,

$$\psi(x) = e^{ik_F x} \psi_+(x) + e^{-ik_F x} \psi_-(x), \quad (\text{A.23})$$

где

$$\psi_r(x) = -\frac{ir}{\sqrt{2L}} \sum_k c_k e^{irkx}. \quad (\text{A.24})$$

Эти поля не являются независимыми, поскольку

$$\psi_+(x) = -\psi_-(-x), \quad (\text{A.25})$$

так что достаточно рассмотреть лишь поле  $\psi_+(x)$ . Важно, что последнее удовлетворяет периодическим граничным условиям на  $[-L, L]$ ,

$$\psi_+(L) = \psi_+(-L), \quad (\text{A.26})$$

и поэтому его можно бозонизовать с помощью процедуры, изложенной выше.

Оператор  $r$ -фермионной плотности

$$\rho(q) = \sum_k : c_{k+q}^+ c_k : = \sum_k (c_{k+q}^+ c_k - \delta_{q,0} \langle c_k^+ c_k \rangle) \quad (\text{A.27})$$

подчиняется бозонному коммутационному соотношению

$$[\rho(q), \rho(-q')] = -\delta_{q,q'} \frac{qL}{\pi}, \quad (\text{A.28})$$

что позволяет ввести бозоны

$$b_q^+ = i \sqrt{\frac{\pi}{Lq}} \rho_q, \quad q > 0. \quad (\text{A.29})$$

Нулевая гармоника  $\rho(q = 0)$  есть оператор числа частиц  $\Delta N$ . Полевой оператор  $r$ -фермионов в представлении бозонизации имеет вид

$$\psi_+(x) = -\frac{i}{\sqrt{2\pi\epsilon}} F e^{i(\phi(x) + \frac{\pi x}{L} \Delta N)}, \quad (\text{A.30})$$

где введена бозонная фаза

$$\phi(x) = \frac{i\pi}{L} \sum_{q \neq 0} \frac{e^{-iqx - \alpha|q|}}{q} \rho_q, \quad (\text{A.31})$$

лестничный оператор  $F$ , и ультрафиолетовое обрезание  $\epsilon$ , по порядку величины равное  $k_F^{-1}$ .

Плотность  $r$ -фермионов связана с бозонной фазой соотношением

$$\rho_+(x) = : \psi_+^\dagger(x) \psi_+(x) : = \frac{\partial_x \phi}{2\pi} + \frac{\Delta N}{2\pi}, \quad (\text{A.32})$$

причем  $\rho_-(x) = \rho_+(-x)$ .

Плотность реальных электронов, с учетом соотношения (A.23), равна

$$\rho(x) = \rho_{\text{lw}}(x) + \rho_{\text{CDW}}(x), \quad (\text{A.33})$$

где первый член описывает длинноволновые флуктуации плотности

$$\rho_{\text{lw}}(x) = \rho_+(x) + \rho_-(x), \quad (\text{A.34})$$

а второй член описывает короткомасштабные корреляции электронов:

$$\rho_{\text{CDW}}(x) = e^{-2ik_F x} \psi_+^\dagger(x) \psi_-(x) + h.c. \quad (\text{A.35})$$

В представлении бозонизации оператор плотности имеет вид

$$\rho(x) = \frac{k_F}{\pi} - \frac{1}{\pi} \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{k_F}{\pi} \cos(2k_F x - 2\phi(x) - 2f(x)), \quad (\text{A.36})$$

где  $\phi(x) = \frac{1}{2}(\phi(-x) - \phi(x))$ , а функция  $f(x)$  есть дополнительная фаза, отражающая наличие границ с нулевыми условиями на них:

$$f(x) = \frac{1}{4i} [\phi(x), \phi(-x)] = \frac{1}{2} \arctan \frac{\sin(2\pi x/L)}{e^\beta - \cos(2\pi x/L)}, \quad (\text{A.37})$$

где безразмерный параметр обрезания равен  $\beta = \pi\epsilon/L \approx N^{-1}$ .

Кинетическая энергия бозонизуется с помощью теоремы Кронига:

$$H_0 = v_F \sum_{q>0} q : b_q^\dagger b_q : + \frac{\pi v_F}{2L} (\Delta N)^2. \quad (\text{A.38})$$

Парное взаимодействие электронов дается оператором

$$U = \frac{1}{2} \int_0^L dx dy \rho(x) U(x-y) \rho(y), \quad (\text{A.39})$$

где плотность  $\rho(x)$  определяется уравнением (A.36). В рассматриваемой модели в операторе взаимодействия удерживается лишь прямой член

$$U_d = \frac{1}{2} \int_0^L dx dy (\rho_+(x)\rho_+(y) + \rho_-(x)\rho_-(y)) U(x-y) \quad (\text{A.40})$$

и перекрестный член

$$U_c = \frac{1}{2} \int_0^L dx dy (\rho_+(x)\rho_-(y) + \rho_-(x)\rho_+(y)) U(x-y). \quad (\text{A.41})$$

Для короткодействующего взаимодействия  $U(x-y) = U\delta(x-y)$ , эти члены упрощаются:

$$U_d = \frac{U}{2} \int_{-L}^L dx \rho_+^2(x), \quad (\text{A.42})$$

$$U_c = \frac{U}{2} \int_{-L}^L dx \rho_+(x)\rho_+(-x). \quad (\text{A.43})$$

Группируя все члены и используя бозонное представление для оператора плотности (A.32), мы получаем гамильтониан модели:

$$H = H_0 + U_d + U_c = \left( v_F + \frac{U}{2\pi} \right) \sum_{q>0} q \left( b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right) - \frac{U}{4\pi} \sum_{q>0} q (b_q^\dagger b_q^\dagger + b_q b_q) + \frac{\pi}{2L} \left( v_F + \frac{U}{\pi} \right) (\Delta N)^2. \quad (\text{A.44})$$

Гамильтониан диагонализуется преобразованием Боголюбова

$$\tilde{b}_q = e^{iS} b_q e^{-iS}, \quad (\text{A.45})$$

где

$$S = \frac{i}{2} \sum_{q>0} \xi_q (b_q^\dagger b_q^\dagger - b_q b_q), \quad (\text{A.46})$$

при условии, что  $e^{2\xi} = (1 + U/\pi v_F)^{-1/2}$ . Параметр взаимодействия  $g \equiv e^{2\xi}$  изменяется в интервале (0,1) для отталкивающего взаимодействия, и равен единице для свободных электронов. Диагональный гамильтониан имеет вид

$$H = \sum_{q>0} qv(q)\tilde{b}_q^+\tilde{b}_q + \frac{\pi}{2L}v_N(\Delta N)^2, \quad (\text{A.47})$$

где скорости бозонных возбуждений и нулевых мод равны, соответственно,

$$v(q) = \frac{v_F + U/2\pi}{\cosh 2\xi}, \quad v_N = v_F + \frac{U}{\pi}. \quad (\text{A.48})$$

## Приложение Б

### Электростатика двумерного слоя с затвором

В этом разделе мы выведем потенциал электрон-электронного взаимодействия в двумерном слое, снабженном металлическим затвором, а также найдем действующие на электроны в слое электрические поля, которые определяют величину парного спин-орбитального взаимодействия.

Рассмотрим заряд  $-e$ , расположенный в начале координат ( $\mathbf{r} = 0, z = 0$ ) двумерного слоя, где  $\mathbf{r}$  обозначает радиус-вектор в плоскости слоя. Найдем потенциал  $\varphi(\mathbf{r})$ , создаваемый этим зарядом в точке  $\mathbf{r}$  в слое.

Слой предполагается чрезвычайно тонким. Диэлектрические свойства двумерного слоя адекватно описываются двумерной зарядовой восприимчивостью  $\chi$ , а не диэлектрической постоянной [222; 223]. Свойства двумерного слоя сильно анизотропны. Так, перпендикулярная восприимчивость  $\chi_n$  крайне мала по сравнению с  $\chi$  для атомно тонких слоев [289], и мы пренебрежем ей в дальнейшем.

Восприимчивость  $\chi$  связывает двумерный вектор поляризации  $\mathbf{P}_\tau$ , определенный как дипольный момент элемента поверхности, с полем в плоскости  $\mathbf{E}_\tau$ :

$$\mathbf{P}_\tau = \chi\delta(z)\mathbf{E}_\tau = -\chi\delta(z)\nabla_r\varphi, \quad (\text{Б.1})$$

так что плотность поляризационного заряда оказывается равна

$$\rho = -\nabla \cdot \mathbf{P}_\tau = \chi\delta(z)\Delta_r\varphi. \quad (\text{Б.2})$$

Уравнение Пуассона, таким образом, имеет вид:

$$\Delta_{r,z}\varphi = 4\pi e\delta(\mathbf{r})\delta(z) - 4\pi\chi\delta(z)\Delta_r\varphi. \quad (\text{Б.3})$$

Решим его двумерным преобразованием Фурье, которое дает нам

$$\varphi_{zz} - k^2\varphi = 4\pi e\delta(z) + 4\pi\chi k^2\delta(z)\varphi. \quad (\text{Б.4})$$

Решение, отвечающее нулевому граничному условию на затворе, есть

$$\varphi(k,z) = -\frac{4\pi e}{k} \begin{cases} \frac{\sinh k(z + \frac{a}{2})}{e^{\frac{ka}{2}} + 4\pi\chi k \sinh(\frac{ka}{2})}, & -\frac{a}{2} \leq z \leq 0, \\ \frac{e^{-kz}}{1 + 4\pi\chi k + \coth(\frac{ka}{2})}, & z \geq 0. \end{cases} \quad (\text{Б.5})$$

Найденное решение позволяет нам определить потенциал электрон-электронного взаимодействия [174]:

$$U(r) = -e\varphi(r,z)|_{z=0} = 2e^2 \int_0^\infty \frac{J_0(kr) dk}{1 + 4\pi\chi k + \coth(\frac{ka}{2})}, \quad (\text{Б.6})$$

где  $J_0$  есть функция Бесселя первого рода. При  $r \ll a$  он переходит в потенциал Рытовой-Келдыша [214; 216].

Эффективное электрическое поле  $\mathfrak{E}(\mathbf{r}) \equiv (\mathbf{E}_\tau, E_n)$ , действующее на электрон в двумерном слое, зависит от микроскопической модели слоя. Для определенности рассмотрим случай, когда электроны расположены симметрично в окрестности слоя. Тогда

$$\begin{aligned} E_n(r) &= \frac{1}{2} \left( -\frac{\partial\varphi}{\partial z} \Big|_{z=-0} - \frac{\partial\varphi}{\partial z} \Big|_{z=+0} \right) \\ &= e \int_0^\infty \frac{J_0(kr) e^{-\frac{ka}{2}} k dk}{e^{\frac{ka}{2}} + 4\pi\chi k \sinh(\frac{ka}{2})}. \end{aligned} \quad (\text{Б.7})$$

Компонента поля в плоскости определяется из уравнения (Б.6) с помощью соотношения  $\mathbf{E}_\tau(\mathbf{r}) = \frac{1}{e} \nabla_r U$ .

## Приложение В

### Асимптотика нулей функции Макдональда

Асимптотические формулы для нулей  $x_n$  функции Макдональда  $\mathcal{K}_{i\mu}(x)$  (также известной как модифицированная функция Бесселя второго или третьего рода) чисто мнимого порядка известны из литературы [290] для двух предельных случаев,  $\mu \gg 1$

$$x_n = 2\mu \exp\left(-1 - \frac{\pi(n - \frac{1}{4})}{\mu}\right), \quad (\text{B.1})$$

и  $\mu \ll 1$

$$x_n = 2 \exp\left(-\frac{\pi n}{\mu} - \gamma\right), \quad (\text{B.2})$$

где  $\gamma$  есть постоянная Эйлера-Маскерони, и  $n = 1, 2, \dots$

Уравнение (B.2) широко используется в литературе, посвященной потенциалу  $1/x^2$  [238; 239; 241]. Однако, оно малоприспособно для наших целей, поскольку при исчезающе малом спин-орбитальном взаимодействии связанные состояния не образуются. Нас интересует приближение, годное от промежуточных значений  $\mu \approx 0.5 \dots 1$  до больших значений  $\mu \gg 1$ . Принимая во внимание, что в промежуточном случае все  $x_n \ll 1$ , разложим функцию Макдональда в степенной ряд в окрестности  $x = 0$  [221],

$$\mathcal{K}_{i\mu}(x) = \frac{\pi}{2 \sin(i\pi\mu)} \left[ \frac{(x/2)^{-i\mu}}{\Gamma(1 - i\mu)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x^2/4)^k}{k!(1 - i\mu)_k} - \frac{(x/2)^{i\mu}}{\Gamma(1 + i\mu)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x^2/4)^k}{k!(1 + i\mu)_k} \right]. \quad (\text{B.3})$$

Следовательно, нули  $\mathcal{K}_{i\mu}(x)$  определяются из соотношения

$$\left(\frac{x}{2}\right)^{2i\mu} = \frac{\Gamma(1 + i\mu)}{\Gamma(1 - i\mu)} \frac{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x^2/4)^k}{k!(1 - i\mu)_k}}{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x^2/4)^k}{k!(1 + i\mu)_k}} = -e^{2i \arg \Gamma(i\mu)} + O(x^2). \quad (\text{B.4})$$

Прологарифмируем:

$$\log x_n = -\frac{\pi n}{\mu} + \log 2 + \frac{\pi}{2\mu} + \frac{1}{\mu} \arg \Gamma(i\mu). \quad (\text{B.5})$$

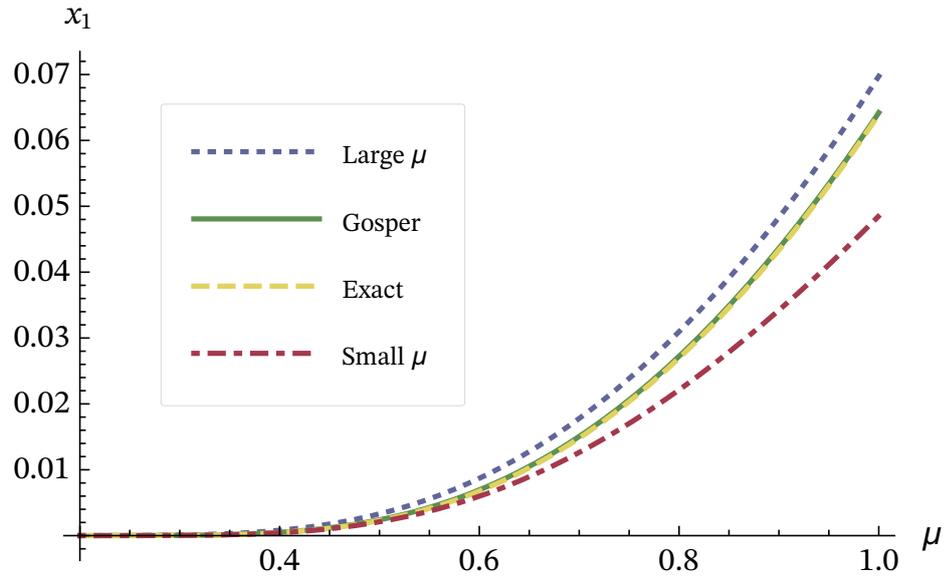


Рисунок В.1 — Первый ноль  $x_1$  функции  $\mathcal{K}_{i\mu}(x)$  в зависимости от  $\mu$ .

Воспользуемся приближением Госпера [291] для Гамма-функции:

$$\arg \Gamma(i\mu) \sim -\frac{\pi}{2} - \mu + \mu \log \mu + \frac{1}{2} \arctan(6\mu). \quad (\text{B.6})$$

Окончательно, получим

$$x_n(\mu) = 2\mu \exp\left(-1 - \frac{\pi n}{\mu} + \frac{1}{2\mu} \arctan(6\mu)\right). \quad (\text{B.7})$$

Для больших  $\mu$  эта формула переходит в уравнение (В.1). Точность этого приближения для промежуточных значений  $\mu$  можно проверить путем сравнения с точным ответом и с приближениями (В.1) и (В.2) на Рисунке В.1.

## Приложение Г

### Диагонализация гамильтониана парного спин-орбитального взаимодействия

В этом разделе мы получим спектр элементарных возбуждений латтинджерской жидкости с парным спин-орбитальным взаимодействием, диагонализовав гамильтониан (4.37) преобразованием Боголюбова-Тябликова.

Задача о диагонализации гамильтониана, представляющего собой квадратичную форму по бозонным операторам, ставится следующим образом [273]. Зная действительные симметричные матрицы  $A_{ik}$  и  $B_{ik}$ , определяющие коммутатор квадратичного гамильтониана с бозе-операторами

$$[H, a_k^+] = \sum_i a_i^+ A_{ik} + a_i B_{ik}, \quad (\text{Г.1})$$

построить унитарное преобразование от старых бозе-операторов  $a_k$  к новым бозонным операторам  $\alpha_\nu$ , в которых гамильтониан диагонален, и определить собственные значения энергии. Поскольку унитарное преобразование от  $a_k$  к  $\alpha_\nu$

$$\begin{aligned} \alpha_\nu^+ &= \sum_k a_k^+ u_{k\nu} - a_k v_{k\nu} \\ \alpha_\nu &= \sum_k a_k u_{k\nu} - a_k^+ v_{k\nu} \end{aligned} \quad (\text{Г.2})$$

сохраняет канонические коммутационные соотношения, действительные матрицы  $u$  и  $v$  удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} u^\top v - v^\top u &= 0 \\ u^\top u - v^\top v &= 1. \end{aligned} \quad (\text{Г.3})$$

Легко показать, что два этих соотношения эквивалентны одному следующему условию:

$$(u + v)^\top (u - v) = 1. \quad (\text{Г.4})$$

Коль скоро гамильтониан  $H$  диагонален по новым бозе-операторам, справедливо соотношение

$$[H, \alpha_\nu^\dagger] = E_\nu \alpha_\nu^\dagger. \quad (\Gamma.5)$$

Составим из собственных значений энергии  $E_i$  диагональную матрицу  $E_{ik} = E_i \delta_{ik}$ . Перейдем в уравнении (Г.5) к старым бозе-операторам  $a_i$ . Тогда мы получим систему

$$\begin{aligned} Au + Bv &= uE \\ Av + Bu &= -vE. \end{aligned} \quad (\Gamma.6)$$

Складывая два этих уравнения и умножая сумму слева на  $(A - B)$ , мы приходим к центральному уравнению метода Боголюбова-Тябликова:

$$(A - B)(A + B)(u + v) = (u + v)E^2. \quad (\Gamma.7)$$

Решая эту задачу на собственные значения, мы получаем квадраты энергий элементарных возбуждений и матрицу собственных векторов  $u + v$ . Нормировка собственных векторов согласно

$$(u + v)^\dagger (A + B)(u + v) = E \quad (\Gamma.8)$$

влечет выполнение соотношения (Г.4), так как в силу (Г.6)

$$(u + v)^\dagger (A + B)(u + v) = (u + v)^\dagger (u - v)E. \quad (\Gamma.9)$$

Такая нормировка корректна, поскольку собственные векторы неэрмитовой матрицы  $(A - B)(A + B)$ , отвечающие различным собственным значениям, взаимно ортогональны с весом  $(A + B)$ . В самом деле, если два собственных вектора  $x_i$  таковы, что  $(A - B)(A + B)x_i = \lambda_i x_i$  для  $i = 1, 2$ , то

$$\begin{aligned} \langle x_2 | (A + B)x_1 \rangle &= \frac{1}{\lambda_2} \langle (A - B)(A + B)x_2 | (A + B)x_1 \rangle \\ &= \frac{1}{\lambda_2} \langle (A + B)x_2 | (A - B)(A + B)x_1 \rangle \\ &= \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \langle (A + B)x_2 | x_1 \rangle = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \langle x_2 | (A + B)x_1 \rangle, \end{aligned} \quad (\Gamma.10)$$

откуда следует, что при  $\lambda_1 \neq \lambda_2$  справедливо  $\langle x_2 | (A + B)x_1 \rangle = 0$ . В случае кратных собственных значений вырождение следует снять малым шевелением исходного гамильтониана, то есть введением инфинитезимального возмущения.

Применим изложенный подход к диагонализации гамильтониана (4.37). Для данного  $q$  зафиксируем порядок следования операторов  $a_+(q)$ ,  $a_-(q)$ ,  $a_+(-q)$  и  $a_-(-q)$  и перенумеруем их индексом  $i = 1 \dots 4$ . Тогда матрицы в уравнении (Г.1) примут вид

$$A = \frac{\hbar q v_F}{2} \begin{pmatrix} 2 + \alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q & \mathcal{U}_q & 0 & 0 \\ \mathcal{U}_q & 2 - \alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 - \alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q & \mathcal{U}_q \\ 0 & 0 & \mathcal{U}_q & 2 + \alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q \end{pmatrix} \quad (\text{Г.11})$$

и

$$B = \frac{\hbar q v_F}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathcal{U}_q & \alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q \\ 0 & 0 & -\alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q & \mathcal{U}_q \\ \mathcal{U}_q & -\alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q & 0 & 0 \\ \alpha_* \mathcal{E}_q + \mathcal{U}_q & \mathcal{U}_q & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{Г.12})$$

Решение задачи на собственные значения (Г.7) с полученными матрицами  $A$  и  $B$  представляет собой элементарную, даже если несколько громоздкую процедуру. Найденные собственные значения даются формулой (4.38).