

К 100-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ И.Е. ТАММА

Приграничные состояния в неоднородных полупроводниковых структурах

Б.А. Волков, Б.Г. Идлис, М.Ш. Усманов

Рассмотрены условия возникновения и спектр локализованных электронных состояний в различных неоднородных структурах из узкощелевых полупроводников с взаимно инвертированными зонами. Рассмотрение основано на применении методов суперсимметрии и факторизации к решению уравнения типа Дирака с неоднородными внешними потенциалами для одномерных, двумерных и трехмерных систем.

PACS numbers: 71.90.+q, 73.20.-r, 03.65.Pm

Содержание

1. Классификация неоднородностей в двухзонных полупроводниковых структурах (799).
 2. Одномерные полупроводниковые гетероструктуры (800).
 - 2.1. Симметричный гетерокontakt. 2.2. Несимметричный инверсный контакт. 2.3. Сегнетоэлектрическая доменная стенка. 2.4. Вырожденные приграничные состояния.
 3. Одномерные ограниченные полупроводниковые структуры (802).
 - 3.1. Прямоугольная квантовая яма из инверсных контактов. 3.2. Пленка из инвертированного полупроводника. 3.3. Сегнетоэлектрический домен. 3.4. Спектр приграничных состояний в магнитном поле.
 4. Дву- и трехмерные неоднородные структуры (805).
 - 4.1. Локализованные состояния вблизи линейных и точечных дефектов. 4.2. Приграничные состояния в дву- и трехмерных квантовых ямах.
 5. Приложение. Методы факторизации и суперсимметрии в применении к решению уравнения Дирака (806).
 - 5.1. Одномерный случай. 5.2. Многомерный случай.
- Список литературы (810).

1. Классификация неоднородностей в двухзонных полупроводниковых структурах

Известно, что для описания свойств узкощелевых полупроводников широко применяется **кп**-приближение. В простейшем двухзонном приближении для соединений типа A^4B^6 **кп**-схема приводит к гамильтониану типа Дирака, в котором роль скорости света играет матричный элемент скорости для межзонных переходов [1].

В рамках такого подхода различные типы неоднородностей полупроводниковых структур можно описать с

помощью включения в соответствующий гамильтониан внешних полей. Для гамильтониана Дирака таким полям соответствуют ковариантные билинейные формы и уравнение Дирака имеет вид

$$[v\gamma^0\gamma(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \gamma^0\Delta + \Sigma\mathbf{M} + \gamma^0\Sigma\mathbf{B} + i\gamma\mathbf{u} + \gamma^0\gamma_5 P + i\gamma^5 M_0 + G]\hat{\Psi} = E\hat{\Psi}, \quad (1.1)$$

где γ^μ — матрицы Дирака, $\gamma_5 = \gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$, Σ — диагональная матрица спина, $\mathbf{p} = -i\nabla$ — оператор импульса, v — матричный элемент межзонного перехода, который считается константой. Волновая функция представляет собой столбец из спиноров Ψ_1 и Ψ_2 , относящихся к двум ближайшим термам, формирующим зону проводимости и валентную зону полупроводниковой структуры.

Величины G и \mathbf{A} — обычные скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля. Роль $G(\mathbf{r})$ может также играть изменяющаяся в пространстве работа выхода. Поле $\Delta(\mathbf{r})$ характеризует изменение ширины запрещенной зоны [2, 3].

Взаимодействие $i\gamma\mathbf{u}$, обусловленное полярным вектором \mathbf{u} , появляется в полупроводниках A^4B^6 , претерпевающих сегнетоэлектрический фазовый переход. При этом вектор \mathbf{u} пропорционален поляризации [4], и в силу анизотропии оптического деформационного потенциала g взаимодействие $i\gamma\mathbf{u}$ следует записывать в виде $ig_z\gamma_3u_z + ig_\perp\gamma_\perp\mathbf{u}_\perp$ (например, для $\text{Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$, когда ось z параллельна кристаллографическому направлению [111]). В образце, содержащем сегнетоэлектрические домены, поле \mathbf{u} меняется в пространстве. Поле M_0 также появляется в полупроводниках-сегнетоэлектриках и обусловлено дополнительным вкладом в спин-орбитальное взаимодействие, связанным с потерей центра инверсии.

Диагональные члены $\Sigma\mathbf{M}$ и $\gamma^0\Sigma\mathbf{B}$ соответствуют зеемановскому взаимодействию ($H_z = \mu_B\Sigma H$, μ_B — магнетон Бора) с учетом вклада в g -факторы удаленных зон [5]. Тот же вид имеет обменное взаимодействие H_{ex} с магнитными примесями, когда спиновая плотность четна. Такая ситуация реализуется в полумагнитных

Б.А. Волков, Б.Г. Идлис, М.Ш. Усманов. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
117924 Москва, Ленинский просп. 53
Тел. (095) 135-73-44

Статья поступила 28 апреля 1995 г.

полупроводниках A^4B^6 , например, $Pb_{1-x}Mn_xTe$ или $Pb_{1-x}Eu_xTe$ [6, 7]. Матричный элемент $\gamma^0\gamma_5 P$ также появляется благодаря обменному взаимодействию с магнитными примесями. Только в этом случае примеси должны быть антиферромагнитно упорядочены и должны располагаться в междоузлиях (тогда спиновая плотность нечетна и матричный элемент $\langle L^- | H_{ex} | L^+ \rangle$ между L -зонами противоположной четности отличен от нуля, что соответствует появлению поля $\gamma^0\gamma_5 P$).

Таким образом, все перечисленные выше поля могут быть, в принципе, реализованы в полупроводниках A^4B^6 . Изменением состава твердых растворов можно формировать различные гетеропереходы. Сегнетоэлектрический фазовый переход в $Pb_{1-x}Ge_xTe$ и $Pb_{1-x}Sn_xTe$ позволяет моделировать векторное поле \mathbf{u} и псевдоскалярное поле M_0 . Высокая растворимость магнитных примесей дает возможность создавать поля \mathbf{M} , \mathbf{B} и P .

В дальнейшем нас будут интересовать только те поля, которые могут приводить к связанным на неоднородностях системы электронным состояниям. В работах [2–4, 8] показано, что таковыми являются поля Δ , \mathbf{u} , P . Оставляя в гамильтониане (1.1) только эти поля, а также потенциалы $G(\mathbf{r})$ и A , получим

$$\hat{H}\hat{\Psi} = \{v\gamma^0\gamma(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \gamma^0\Delta(\mathbf{r}) + i\gamma\mathbf{u}(\mathbf{r}) + \gamma^0\gamma_5 P + G(\mathbf{r})\}\hat{\Psi} = E\hat{\Psi}. \quad (1.2)$$

Отметим также, что в отсутствие поля $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ уравнения (1.1) и (1.2), соответствующие случаям $\Delta = \text{const}$, $P = P(\mathbf{r})$ (антиферромагнитная доменная стенка) и $P = \text{const}$, $\Delta = \Delta(\mathbf{r})$ (гетеропереход с изменением ширины запрещенной зоны в однородном ферромагнетике), являются математически эквивалентными [8]. В самом деле, гамильтониан

$$\hat{H}_1\hat{\Psi} = \{v\gamma^0\gamma(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \gamma^0\Delta(\mathbf{r}) + \gamma^0\gamma_5 P + G(\mathbf{r})\}\hat{\Psi} = E\hat{\Psi} \quad (1.3)$$

после унитарного преобразования $\hat{\Psi} = \hat{U}\hat{\Phi} = \exp(\gamma^5\pi/4)\hat{\Phi} = (1 + \gamma^5)\hat{\Phi}/\sqrt{2}$, приобретает вид

$$\hat{H}_2\hat{\Phi}\{v\gamma^0\gamma(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) - \gamma^0 P + \gamma^0\gamma_5\Delta(\mathbf{r}) + G(\mathbf{r})\}\hat{\Phi} = E\hat{\Phi}. \quad (1.4)$$

Из сравнения выражений (1.3) и (1.4) видно, что гамильтониан \hat{H}_1 совпадает с гамильтонианом \hat{H}_2 с точностью до замены $\Delta(\mathbf{r}) \rightarrow P$, $P \rightarrow \Delta(\mathbf{r})$ и $\hat{\Psi} \rightarrow \hat{\Phi}$. Поэтому в дальнейшем мы будем ограничиваться рассмотрением полей $\Delta(\mathbf{r})$, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, $G(\mathbf{r})$ и $A(\mathbf{r})$.

Анализировать гамильтониан типа Дирака с неоднородными внешними потенциалами удобно с помощью методов суперсимметрии и факторизации. Процедура приведения соответствующего гамильтониана к суперсимметричному виду описана в Приложении. Там же показано, что диагонализация гамильтониана (1.2) возможна только в том случае, если пространственная зависимость потенциалов определяется одной и той же функцией $f(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{r}) &= \Delta_1 + \Delta_0 f(\mathbf{r}), \\ u(\mathbf{r}) &= u_1 + u_0 f(\mathbf{r}), \\ G(\mathbf{r}) &= g_0 f(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Поскольку любая неоднородность вызывает, как правило, изменение как ширины запрещенной зоны, так и работы выхода и поляризации, то такое предположение вполне оправдано.

2. Одномерные полупроводниковые гетероструктуры

В этом разделе мы продемонстрируем применение метода суперсимметрии к исследованию электронных спектров гетероструктур, что соответствует одномерной зависимости $f = f(z)$. Отметим, что условие существования нулевой моды суперсимметричного гамильтониана \hat{H}_s накладывает определенные ограничения на параметры полупроводниковой структуры, первое из которых имеет вид (условие вещественности суперпотенциала $W_\lambda(z)$ (5.11))

$$\Delta_0^2 + u_0^2 - g_0^2 > 0. \quad (2.1)$$

Чтобы получить остальные ограничения на параметры полупроводниковой структуры, нужно знать асимптотические значения функциональной зависимости соответствующих параметров. При этом удобно условия (5.19) нормируемости волновой функции нулевой моды переписать в виде

$$\text{sign}[W_\lambda(\pm\infty)] = -\text{sign}[W_\lambda(\mp\infty)] \quad (2.2)$$

и воспользоваться явным выражением для суперпотенциала $W_\lambda(z)$ (выражения (5.11), (5.12) в Приложении). В общем случае эти выражения довольно громоздки [9], поэтому ниже мы ограничимся рассмотрением некоторых частных случаев.

2.1. Симметричный гетерокontakt

В такой неоднородной структуре меняется только ширина запрещенной зоны, и среди потенциалов (1.5) имеется только потенциал $\Delta(z)$ ($u_0 = u_1 = g_0 = 0$), и выражение для суперпотенциала (5.11) имеет простой вид

$$W(z) = \Delta_0 f(z) + \Delta_1 \equiv \Delta(z). \quad (2.3)$$

Асимптотики функции $f(z)$ при $z = \pm\infty$ обозначим через μ_1 и μ_2 , соответственно (для определенности, будем считать $\mu_1 < \mu_2$). Из (2.2) и (2.3) следует, что нулевая мода гамильтониана \hat{H}_s существует только в том случае, если

$$\mu_1 \mu_2 < 0 \quad \text{и} \quad \mu_1 \Delta_0 > \Delta_1. \quad (2.4)$$

Другими словами, условием возникновения нулевой моды является взаимная инверсия зон полупроводников, образующих гетеропереход. Такой гетеропереход получил название инверсного контакта [2].

В данном случае, как это следует из общих теорем суперсимметричной квантовой механики [10], возникает связанное состояние только для частиц с одним направлением спина. Спектр этих состояний является линейным (далее все энергетические параметры будем считать нормированными на величину $\hbar v$)

$$E_\lambda = \lambda k_\perp, \quad (2.5)$$

а соответствующие волновые функции имеют вид

$$\hat{\Psi}_{\lambda}^0 = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \lambda \exp(i\theta) \end{pmatrix} \exp \left[\int_0^z W(x) dx + i \mathbf{k}_{\perp} \mathbf{r} \right], \quad (2.6)$$

где $\exp(i\theta) \equiv (k_x + ik_y)/|\mathbf{k}_{\perp}|$, $\mathbf{k}_{\perp} = (k_x, k_y, 0)$ — волновой вектор. В плоскости (x, y) функции $\hat{\Psi}_{\lambda}^0$ удовлетворяют уравнению Дирака с нулевой массой, унитарно эквивалентному уравнению Вейля, описывающему нейтрину [2]. Таким образом, локализованные в плоскости инверсного контакта электроны ведут себя как двумерный газ заряженных нейтрино. Эти состояния существуют независимо от конкретного вида $\Delta(z)$ и поэтому устойчивы относительно флуктуаций состава полупроводников, образующих гетерокontakt. Единственное требование — это противоположность знаков асимптотик $\Delta(\pm\infty)$.

2.2. Несимметричный инверсный контакт

Учет изменения работы выхода из контактирующих друг с другом полупроводников приводит к тому, что двумерные электронные состояния существуют в ограниченной области энергий и поперечных импульсов [3]. В самом деле, в этом случае ($g_0 \neq 0$) суперпотенциал (5.11) имеет вид

$$W_{\lambda}(z) = \sqrt{A_0^2 - g_0^2} f(z) + \frac{A_1 A_0 + E g_0}{\sqrt{A_0^2 - g_0^2}}, \quad (2.7)$$

зависящий от энергии. Ограниченность спектра связанных состояний вызвана тем, что с ростом энергии $|E|$ суперпотенциал (2.7) становится знакопостоянным, а волновая функция (2.6) — ненормируемой. Таким образом, наличие поля $g(z)$ приводит к ограничению по энергии спектра приграничных состояний, причем безмассовость (линейность) их энергетического спектра

$$E_{\pm}^0 = -\frac{A_1 g_0}{A_0} \pm k_{\perp} \sqrt{1 - \left(\frac{g_0}{A_0}\right)^2} \quad (2.8)$$

и отсутствие вырождения (по псевдочетности) сохраняются. Точки касания линейных и объемных спектров определяются следующими соотношениями [3]

$$(k_{\perp}^{\pm})_{\max} = (\mu_{1,2} A_0 - A_1) \sqrt{\left(\frac{A_0}{g_0}\right)^2 - 1}. \quad (2.9)$$

Здесь μ_1 и μ_2 в правой части (2.9) соответствуют k_{\perp}^+ и k_{\perp}^- в левой части того же выражения.

Из выражения (2.7) для суперпотенциала следует, что вейлевские приграничные состояния существуют лишь при условии $|A_0| < |g_0|$ (т.е. изменение ширины запрещенной зоны в гетероструктуре должно быть больше изменения работы выхода из полупроводников, образующих эту структуру).

Отметим, что наличие конечной работы выхода g_0 приводит к появлению приграничных состояний и в обычных, неинвертированных гетеропереходах. Для резких переходов на это указано в работах [11, 12].

Однако вывод справедлив и для плавных переходов, как это видно из выражения (2.7). Действительно, если асимптотики у функции $f(z)$ при $z = \pm\infty$ одинаковы по знаку, но разные по величине (несимметричный гетеропереход без инверсии зон), то имеется конечный интервал энергий E , в котором соответствующие асимптотики суперпотенциала (2.7) противоположны по знаку. Поэтому такие локализованные на границе раздела состояния должны существовать независимо от формы переходного слоя. По энергии эти состояния перекрываются либо с валентной зоной (при $g_0 > 0$), либо с зоной проводимости (при $g_0 < 0$).

2.3. Сегнетоэлектрическая доменная стенка

При наличии в полупроводниковых гетероструктурах сегнетоэлектрической доменной стенки ($A_0 = g_0 = 0$, $u_{0,1} \neq 0$) суперпотенциал (5.11) приобретает вид

$$W_{\lambda}(z) = u_0 f(z) + u_1 - \lambda k_{\perp}, \quad (2.10)$$

а выражение (5.12) эквивалентно следующему

$$E_s = E^2 - A_1^2. \quad (2.11)$$

Подставляя (2.10) в (2.2) приходим к выводу, что в этом случае условием возникновения нулевой моды является противоположность знаков асимптотик функции $f(z)$ при $z = \pm\infty$ (для определенности считаем $u_0 > u_1$).

Решения, соответствующие нулевой моде

$$\chi^- = c \exp \left\{ - \int_0^z [u(x) \pm k_{\perp}] dx \right\}, \quad (2.12)$$

отвечают двумерным электронным состояниям с энергией $E = +A_1$, локализованным у доменной стенки [4]. Эти решения нормируемы для $k_{\perp} < |u(\pm\infty)|$. В обратном случае, когда $u(+\infty) < 0$, $u(-\infty) > 0$, связанные состояния с $E = +A_1$ отсутствуют, но появляется уровень с $E = -A_1$.

2.4. Вырожденные приграничные состояния

До сих пор мы рассматривали решения, соответствующие нулевой моде суперсимметричного гамильтониана \hat{H}_s (5.10). Но кроме нее на границах раздела полупроводников могут существовать обычные вырожденные приграничные состояния. Чтобы исследовать весь спектр приграничных состояний, необходимо задать конкретный вид функциональной зависимости параметров гетероструктуры. В качестве такой зависимости выберем функцию $f(z) = \text{th}(z/l)$, где l — размер переходного слоя, и воспользуемся результатами раздела 5.1.

В простейшем случае симметричного инверсного контакта ($l_0 = 1/A_0$) выражение (5.30) для спектра приобретает вид

$$E^{\pm} = \pm \frac{[l^2 k_{\perp}^2 - n(n - 2l/l_0)]^{1/2}}{l}, \quad (2.13)$$

который совпадает с результатом работы [2]. Из выражения (2.13) видно, что n должно меняться в интервале $0 < n < 2l/l_0$. При $l < l_0$ существует лишь нулевая мода ($n = 0$). При $l > l_0$ появляются дополнительные дву-

кратно вырожденные ветви приграничных состояний ($n, \lambda = +1$) и ($n = +1, \lambda = -1$). При $l \gg l_0$ дискретные уровни (2.13) образуют квазинепрерывный спектр, заполняя всю запрещенную зону [2, 13].

Отметим также, что каждый раз, когда l достигает целого кратного l_0 , от дираковских зон отщепляется пара приграничных состояний. Связано это с тем, что параметр $a = l/l_0$ в этом случае принимает целые значения и последовательность потенциалов $U_{\pm}(\alpha_n, z)$ (см. выражения (5.23), (5.24)) при $n = a$ сводится к потенциалу $U(a, z) = 0$ (точка отсчета энергии E_s сдвинута на величину $\Delta_0/l = 1/l_0$). Другими словами, потенциал (5.28) становится безотражательным. Это значит, что асимптотики делокализованных волновых функций не содержат отраженной волны и контакт абсолютно прозрачен для электронов дираковского спектра.

Учет несимметричности контакта ($g_0 \neq 0$) не приводит к качественным изменениям относительно картины, рассмотренной выше. При этом число N дираковских уровней внутри щели определяется толщиной контакта

$$N = 2l\sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2} - \frac{1 + \lambda}{2}. \quad (2.14)$$

Для случая сегнетоэлектрической доменной стенки отличны от нуля только коэффициенты u_1, u_0 и Δ_1 . Из выражения (5.30) имеем

$$E^{\pm} = \pm \left\{ \Delta_1^2 + \frac{n(2u_0l - n)}{l^2} \left[1 - \frac{(u_1 - \lambda k_{\perp})^2 l^2}{(u_0l - n)^2} \right] \right\}^{1/2}, \quad (2.15)$$

откуда видно, что условием возникновения дираковского уровня с номером n является выполнение неравенства

$$l > \frac{n(\sqrt{u_0^2 + \Delta_1^2} - u_0)}{\Delta_1^2}. \quad (2.16)$$

Таким образом, приходим к выводу (который сохраняет свою силу и в общем случае потенциала (5.11)), что в плавных гетероструктурах помимо нулевой моды внутри запрещенной зоны существует конечное число двукратно вырожденных дираковских уровней. Эти уровни соответствуют локализованным на границе раздела состояниям и их число определяется толщиной переходного слоя l и параметрами полупроводниковой структуры. В случае же резкого контакта, когда толщина l меньше некоторой критической, при которой возникает первый "дираковский" уровень, имеется только нулевая мода (так называемая "вейлевская" ветвь).

3. Одномерные ограниченные полупроводниковые структуры

3.1. Прямоугольная квантовая яма из инверсных контактов

Рассмотрим прямоугольную квантовую яму шириной $2a$, образованную полупроводником с инвертированными зонами, окруженным двумя разными полупроводниками с прямым расположением зон. Для такой струк-

туры функцию $f(z)$ можно выбрать в виде

$$f(z) = 1 + \mu_L + \mu_R - (1 + \mu_L)\theta(a + z) - (1 + \mu_R)\theta(a - z). \quad (3.1)$$

Здесь θ — ступенчатые функции, а параметры $(1 + \mu_L)$ и $(1 + \mu_R)$ задают высоту левого и правого барьеров, соответственно.

Для резкой зависимости $f(z)$, такой как (3.1), рассмотренный в Приложении метод суперсимметрии неприменим. Однако в данном случае уравнение (5.10) (или его квадрированный аналог) можно решать в каждой области отдельно, учитывая то, что на границах раздела логарифмическая производная χ испытывает скачки

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_{\mp}^{(2)}}{dz} \Big|_{z=-a} - \frac{d\chi_{\mp}^{(1)}}{dz} \Big|_{z=-a} &= \mp(1 + \mu_L)\kappa\chi_{\mp}(-a), \\ \frac{d\chi_{\mp}^{(3)}}{dz} \Big|_{z=+a} - \frac{d\chi_{\mp}^{(2)}}{dz} \Big|_{z=+a} &= \pm(1 + \mu_R)\kappa\chi_{\mp}(a). \end{aligned} \quad (3.2)$$

В результате получим следующее дисперсионное уравнение

$$\begin{aligned} \text{th}(2qa) = \\ = \frac{q(q_L + q_R + \kappa_L - \kappa_R)}{(\kappa + \kappa_L)(\kappa + \kappa_R) - q^2 - q_L q_R + q_L(\kappa + \kappa_R) - q_R(\kappa + \kappa_L)}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

где

$$\begin{aligned} q_{L,R}^2 &= (W_{\lambda} + \kappa_{L,R})^2 - (W_{\lambda} - \kappa)^2 + q^2, \\ q^2 &= (W_{\lambda} - \kappa)^2 - \tilde{E}^2 = (\Delta_1 - \Delta_0)^2 + \\ &+ (u_1 - u_0 - \lambda k_{\perp})^2 - (E + g_0)^2, \\ \kappa_{L,R} &= \kappa\mu_{L,R}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Положим $u_1 = u_0 = g_0 = \Delta_1 = 0$, $\Delta_0 \equiv \kappa$. Тогда выражения (3.4) принимают вид

$$\begin{aligned} q^2 &= \kappa^2 + k_{\perp}^2 - E^2, \\ q_{L,R}^2 &= \kappa_{L,R}^2 + q^2 - \kappa^2. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Пусть для определенности $|\kappa| < |\kappa_{L,R}|$. Тогда вещественные значения q в дисперсионном уравнении (3.3) отвечают уровням, локализованным у стенок квантовой ямы, мнимые значения q при вещественных q_L и q_R — уровням размерного квантования в яме, а мнимые значения q, q_L и q_R — делокализованным состояниям непрерывного спектра. Мы будем интересоваться локализованными состояниями, происхождение которых имеет ту же природу, что и вейлевская ветвь в одиночном инверсном контакте.

Подробный анализ дисперсионного уравнения (3.3) проводился в работе [14]. В частности, при $a \rightarrow \infty$ решением (3.3) является $q = \kappa$ и $E = \pm \lambda k_{\perp}$, т.е. нулевая мода оказывается двукратно вырожденной ($\lambda = \pm 1$), причем волновые функции этих состояний локализованы у противоположных границ. При конечных размерах ямы спектр локализованных состояний становится

щелевым

$$E = \pm \sqrt{\kappa^2 - q^2 + k_{\perp}^2}. \quad (3.6)$$

При уменьшении размера ямы до некоторого критического значения $a = a_c$ (зависящего от соотношения между κ и $\kappa_{L,R}$) величина q становится чисто мнимой, т.е. оба уровня (3.6) переходят в уровни размерного квантования. Это свидетельствует о том, что электронно-подобная и дырочно-подобная ветви локализованных состояний отщепляются от верхней и нижней объемных зон соответственно. В связи с этим подчеркнем, что даже в случае отдельного инверсного контакта нулевая мода реально вырождена, поскольку всегда имеется вторая граница раздела "инвертированного" полупроводника, например, с вакуумом.

Вернемся к анализу решений дисперсионного уравнения. В общем случае выражение для a_c довольно громоздко. Для симметричной ямы ($\kappa_L = \kappa_R = \kappa_0$) дисперсионное уравнение совпадает с полученным в работах [15, 16]

$$\text{th}(2qa) = \frac{qq_0}{\kappa(\kappa + \kappa_0) - q^2}, \quad (3.7)$$

откуда следует, что

$$2a_c = \frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{\kappa_0 - \kappa}{\kappa_0 + \kappa}}. \quad (3.8)$$

В полностью симметричном случае ($\kappa = \kappa_0$) $a_c = 0$, т.е. локализованные у границ раздела состояния есть при любом размере ямы.

3.2. Пленка из инвертированного полупроводника

Наибольшее значение $2a_c = 1/\kappa$ получается при $\kappa \ll \kappa_0$, что соответствует пленке из полупроводника с инвертированными зонами, окруженной диэлектриком. Оценка этой величины для полупроводников группы А⁴В⁶ ($2\Delta \simeq 100$ мэВ, $v = 3 \cdot 10^7$ см с⁻¹) дает $a_c \simeq 100$ Å. Для такой пленки можно наглядно продемонстрировать происхождение приграничных состояний. Действительно, в этом случае спектр системы полностью дискретен (в поперечном направлении) и дисперсионное уравнение имеет простой вид

$$\text{th}(2qa) = \frac{q}{\kappa}. \quad (3.9)$$

Решения с чисто мнимыми значениями q отвечают уровням размерного квантования с $E > |\kappa|$. Состояниям внутри запрещенной зоны ($E < |\kappa|$) соответствуют вещественные q . Видно, что для полупроводника с прямым расположением зон ($\kappa < 0$) имеются только уровни размерного квантования, которые при уменьшении щели просто сдвигаются к ее краю. При дальнейшем изменении щель, пройдя через нуль, становится отрицательной ($\kappa > 0$), а уровни по-прежнему непрерывным образом сдвигаются к краю, причем число их не меняется. Наконец, по достижении κ некоторой конечной величины (зависящей от толщины пленки $2a$) мнимое решение с минимальным по модулю значением q переходит в вещественное, т.е. ближайшие к краю запрещенной зоны электронный и дырочный уровни размерного квантования попадают внутрь щели, образуя приграничные состояния.

Для пленки наиболее простой вид имеет и волновая функция [15]

$$\hat{\Psi}_{\lambda}(z) = B \begin{pmatrix} \text{sh}[q(a+z)] \\ i\lambda \exp(i\theta) \frac{\sqrt{\kappa^2 - q^2}}{E + \lambda k_{\perp}} \text{sh}[q(a-z)] \\ -i \frac{\sqrt{\kappa^2 - q^2}}{E + \lambda k_{\perp}} \text{sh}[q(a-z)] \\ \lambda \exp(i\theta) \text{sh}[q(a+z)] \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

$$B^2 = \frac{\kappa^2 - q^2}{\kappa - 2a(\kappa^2 - q^2)} \frac{E + \lambda k_{\perp}}{2E}. \quad (3.11)$$

Отметим, что в состоянии с волновой функцией (3.10) максимумы распределения плотностей заряда и спина не совпадают в пространстве. Действительно, плотность заряда $n_{\lambda}(z)$ равна

$$n_{\lambda}(z) = \hat{\Psi}_{\lambda}^{\dagger}(z) \hat{\Psi}_{\lambda}(z) = \tilde{B}^2 \left\{ \frac{E + \lambda k_{\perp}}{2E} \text{sh}^2[q(a+z)] + \frac{E - \lambda k_{\perp}}{2E} \text{sh}^2[q(a-z)] \right\}, \quad (3.12)$$

где

$$\tilde{B}^2 = \frac{\kappa^2 - q^2}{\kappa - 2a(\kappa^2 - q^2)}. \quad (3.13)$$

Распределение спина $\Sigma_{\lambda}(z)$ в соответствии с (5.4) имеет вид

$$\Sigma_{\lambda}(z) = \lambda \hat{\Psi}_{\lambda}^{\dagger} \gamma^0 \hat{\Psi}_{\lambda} = \lambda \tilde{B}^2 \frac{\kappa}{E} \left[1 - \frac{\text{ch}(2qz)}{\text{ch}(2qa)} \right]. \quad (3.14)$$

Отсюда видно, что распределение плотности спина симметрично, с максимумом в центре и обращением в нуль на границах пленки. Плотность же заряда, напротив, сконцентрирована на границах, причем с ростом k_{\perp} "электронные" состояния с положительной четностью прижимаются к правой границе, а с отрицательной четностью — к левой. Для "дырочных" состояний происходит обратное.

Наличие псевдочетности приводит к определенным правилам отбора для оптических переходов между локализованными состояниями со спектром (3.6). В отличие от инверсного контакта матричный элемент скорости (для перехода $E_{\lambda} - E_{\lambda'}^*$) $\mathbf{v} = v \langle \hat{\Psi}_{\lambda'} | \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} | \hat{\Psi}_{\lambda} \rangle$ имеет отличные от нуля компоненты как в плоскости пленки, так и поперек нее

$$\begin{aligned} v_l &= i\lambda v(1 - \delta_{\lambda\lambda'}), \\ v_{k_{\perp}} &= \frac{\lambda v \delta_{\lambda\lambda'} \sqrt{\kappa^2 - q^2}}{|E|}, \\ v_z &= i v \frac{2(2a\kappa - 1)}{\kappa - 2a(\kappa^2 - q^2)} \sqrt{\kappa^2 - q^2} \text{sign}(E) \delta_{\lambda\lambda'}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Отсюда видно, что для света, поляризованного вдоль направления $\mathbf{l} = [\mathbf{n} \times \mathbf{k}_{\perp}]/|\mathbf{k}_{\perp}|$, разрешенными являются переходы с изменением четности, причем выражение для v_l совпадает с соответствующим выражением для инверсного контакта [16]. Для света, поляризованного в плоскости (\mathbf{k}_{\perp}, z) , разрешены переходы с сохранением

четности. В случае инверсного контакта, когда нулевая мода невырождена, такие переходы невозможны. Из (3.15) видно также, что компоненты $v_{k\perp}$ и v_l пропорциональны величине $(\kappa^2 - q^2)^{1/2}$, т.е. уменьшаются с ростом толщины пленки (и в пределе $a \rightarrow \infty$ обращаются в нуль). Связано это с тем, что волновые функции электронных и дырочных состояний с одинаковой четностью локализованы у противоположных границ пленки. Используя (3.15), можно рассчитать частотную зависимость поглощения света с различной поляризацией. Например, коэффициент прохождения света, линейно поляризованного в плоскости пленки, равен [15]

$$R(\omega) = \pi \frac{e^2}{\hbar c n} \left[1 + \frac{E_g^2}{\hbar^2 \omega^2} \right] \theta(\hbar \omega - E_g), \quad (3.16)$$

где $E_g = 2\hbar v(\kappa^2 - q)^{1/2}$ — щель в спектре локализованных состояний, n — показатель преломления света.

Отметим также, что для определения спектра поверхностных состояний в пленке и полубесконечном кристалле узкощелевого полупроводника авторами работы [17] использовался другой подход. А именно, решалось уравнение (5.2) с постоянной щелью $\Delta(z) = \Delta$ (и $g = u = 0$) с применением феноменологических граничных условий

$$\hat{\Psi} = -i\hat{A}(\gamma \cdot \mathbf{n})\hat{\Psi}, \quad (3.17)$$

требующих лишь отсутствия тока через границы раздела. Здесь \mathbf{n} — нормаль к поверхности, \hat{A} — некоторая эрмитова матрица, которая определяется единственным феноменологическим вещественным параметром a_0 :

$$\hat{A} = \left[\left(a_0 + \frac{1}{a_0} \right) + \left(a_0 - \frac{1}{a_0} \right) \gamma^0 \right]. \quad (3.18)$$

Можно показать, что величина a_0 определяется параметрами полупроводниковой структуры и связана с конечной работой выхода $g_0 \neq 0$. Для этого в уравнениях (5.6) и (5.7) следует положить $u(z) = 0$. Тогда оператор канонического преобразования \hat{S} , диагонализующий квадрированное уравнение (5.7), принимает вид

$$\hat{S} = \text{ch} \left(\frac{\alpha}{2} \right) + \gamma^0 \text{sh} \left(\frac{\alpha}{2} \right), \quad \text{th}(\alpha) = \frac{g_0}{\Delta_0}. \quad (3.19)$$

После действия оператора (3.19) на линейное уравнение (5.6) получим

$$\{ \gamma^0 [\gamma^3 \hat{p}_z + w(z)] - i\gamma^3 \lambda k_{\perp} - \tilde{E} \} \hat{\chi} = 0, \quad (3.20)$$

где $w(z) = \sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2} f(z) + \tilde{E}(g_0/\Delta_0)$, $\tilde{E} = E\Delta_0/\sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2}$. Отсюда, учитывая, что оператор псевдочетности \hat{P} коммутирует с оператором \hat{S} и что функция $\hat{\chi}$ удовлетворяет граничным условиям $\hat{\chi} = -i(\gamma \cdot \mathbf{n})\hat{\chi}$, получим

$$\hat{\Psi} = -i\hat{S}(\gamma \cdot \mathbf{n})\hat{S}^{-1}\hat{\Psi} = -i\hat{S}^2(\gamma \cdot \mathbf{n})\hat{\Psi}, \quad (3.21)$$

т.е. матрица \hat{A} в (3.18) совпадает с квадратом оператора (3.19), откуда

$$a_0 = \text{ch}(\alpha) + \text{sh}(\alpha) = \text{sign}(\Delta_0) \sqrt{\frac{1 - g_0/\Delta_0}{1 + g_0/\Delta_0}}. \quad (3.22)$$

Видно, что при $g_0 = 0$ параметр $a_0 = \pm 1$ в зависимости от того, инвертированы зоны полупроводниковой пленки или нет. При $g_0 \neq 0$ он может быть по модулю как меньше, так и больше единицы, что зависит от знака g_0/Δ_0 . Для ступенчатого гетероперехода g_0 представляет собой разность работ выхода из полупроводников. Поэтому при $g_0/\Delta_0 < 0$ разрыв валентной зоны на переходе меньше, чем разрыв зоны проводимости, а при $g_0/\Delta_0 > 0$ — наоборот.

3.3. Сегнетоэлектрический домен

Рассмотрим однородный собственный полупроводник, в котором имеется один электрический домен размером $2a$. Для этого опять используем функцию (3.1) и положим $\Delta_0 = g_0 = u_1 = 0$, $\mu_L = \mu_R = 1$, в результате чего дисперсионное уравнение (3.3) приобретет следующий вид [18]

$$\text{th}(2qa) = \frac{q\sqrt{q^2 - 4\lambda k_{\perp} u_0}}{2u_0(u_0 + \lambda k_{\perp}) - q^2}. \quad (3.23)$$

Корни этого уравнения определяют энергетический спектр локализованных состояний

$$E = \pm \sqrt{\Delta_1^2 - (u_0 + \lambda k_{\perp})^2 - q^2}. \quad (3.24)$$

При $a \rightarrow \infty$ (две бесконечно удаленные друг от друга стенки) решением уравнения (3.23) является $q = u_0 + \lambda k_{\perp}$ и спектр состоит из двух вырожденных ветвей с энергиями $E = \pm \Delta_1$. В случае конечных размеров домена вырождение по λ снимается и спектр локализованных состояний приобретает дисперсию. Анализ уравнений (3.23) и (3.24) показывает [18], что эти состояния существуют в области поперечных импульсов $0 < k_{\perp} < u_0$ ($\lambda = +1$) и $0 < k_{\perp} < k_c$ ($\lambda = -1$), где

$$k_c = u_0 \left(1 - \frac{\sqrt{1 + 16a^2 u_0^2} - 1}{8a^2 u_0^2} \right). \quad (3.25)$$

Для состояний с отрицательной четностью при $k_{\perp} > k_c$ решение уравнения (3.23) становится чисто мнимым, и волновая функция из экспоненциально спадающей на границах домена переходит в осциллирующую, т.е. отвечает состояниям "размерного" квантования внутри домена. Отметим, что кроме этой ветви при $k_{\perp} > k_{n,c}$, где

$$k_{n,c} = \frac{1}{4u_0} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2, \quad (3.26)$$

появляется целая серия "размерно-квантованных" состояний с отрицательной четностью. По мере уменьшения размеров домена в пределе $a \rightarrow 0$ значения $k_{n,c} \rightarrow \infty$ и эти ветви исчезают. При этом поверхностные состояния с $\lambda = +1$ сливаются с ветвью объемного спектра $E^- = \pm[\Delta_1^2 + (u_0 - k_{\perp})^2]^{1/2}$, а состояния с $\lambda = -1$ переходят в размерно квантованные ($k_c \rightarrow 0$) и сливаются с ветвью $E^+ = \pm[\Delta_1^2 + (u_0 + k_{\perp})^2]^{1/2}$, и мы имеем обычный непрерывный спектр объемного полупроводника-сегнетоэлектрика.

3.4. Спектр приграничных состояний в магнитном поле

Рассмотрим, как модифицируется спектр приграничных состояний в однородном магнитном поле H , направленном вдоль оси z . Для этого в гамильтониане (1.2)

потенциалы \mathbf{u} , P и G положим равными нулю, а векторный потенциал \mathbf{A} выберем в калибровке $\mathbf{A} = [\mathbf{H} \cdot \mathbf{p}]/2$, где $\mathbf{p} = (x, y)$. В этом случае гамильтониан приобретает вид

$$\hat{H}_A = [\gamma^0 \gamma^3 \hat{p}_z + \gamma^0 \Delta(z) + \gamma^0 (\gamma_+ \hat{\pi}_- + \gamma_- \hat{\pi}_+)], \quad (3.27)$$

где $\gamma_{\pm} = (\gamma^1 \pm i\gamma^2)$, $\hat{\pi}_{\pm} = (\hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y)$, $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$. Можно убедиться, что с этим гамильтонианом коммутирует оператор

$$\hat{P}_A = \gamma^5 (\gamma [\mathbf{n} \times \hat{\pi}_{\perp}]) = i\gamma^0 \gamma^3 (\gamma_+ \hat{\pi}_- + \gamma_- \hat{\pi}_+), \quad (3.28)$$

который является простым обобщением оператора (5.3) на случай наличия магнитного поля. Собственные функции оператора (3.28) определяются следующим образом. Используя коммутационные свойства матриц γ_{\pm} , получим

$$\hat{P}_A^2 = \hat{\pi}_+ \hat{\pi}_- + (1 + \hat{\Sigma}_3) \frac{\hbar^2}{L^2}, \quad (3.29)$$

где $\hat{\Sigma}_3$ — оператор проекции спина на ось z , $L^2 = \hbar/|e|H$ — магнитная длина. Собственными функциями оператора $\hat{\pi}_+ \hat{\pi}_-$ являются функции осциллятора Ландау $\Phi_n(x, y)$, причем

$$\hat{\pi}_+ \hat{\pi}_- \Phi_n(x, y) = 2n \frac{\hbar^2}{L^2} \Phi_n(x, y), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.30)$$

Поскольку оператор спина $\hat{\Sigma}$ диагонален, компоненты собственного биспинора $\hat{\Psi}$ оператора (3.29), а следовательно, и оператора \hat{P}_A можно представить в виде

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{1,3} &= \Phi_{n-1}(x, y) f_{1,3}(z), \\ \hat{\Psi}_{2,4} &= \Phi_n(x, y) f_{2,4}(z). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Тогда с учетом того, что

$$\hat{P}_A \hat{\Psi} = \frac{\lambda \hbar}{L} \sqrt{2n} \hat{\Psi}, \quad (3.32)$$

уравнение Дирака для $\hat{\Psi}$ примет следующий вид

$$\left\{ \gamma^0 [\gamma^3 \hat{p}_z + \Delta(z)] - i\gamma^3 \lambda \hbar v \frac{\sqrt{2n}}{L} - E \right\} \hat{\Psi} = 0. \quad (3.33)$$

Из сравнения этого выражения с (5.6) следует, что все различие сводится к замене k_{\perp} на величину $\sqrt{2n}/L$, т.е. в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси z , происходит квантование Ландау и спектр (3.6) приобретает вид

$$E = \pm \sqrt{\kappa^2 - q^2 + \frac{2n}{L^2}}. \quad (3.34)$$

При $n = 0$ компоненты $\psi_{1,3}^{(0)} = 0$, так что нулевые уровни Ландау с энергиями $E = \pm \sqrt{\kappa^2 - q^2}$ не вырождены. Остальные уровни с $n = 0$ остаются двукратно вырожденными по четности $\lambda = \pm 1$.

Аналогично (3.15) можно вычислить матричные элементы переходов между уровнями Ландау. Для света, распространяющегося перпендикулярно магнитному полю и поляризованного вдоль оси z (конфигурация Фойгта), разрешены переходы только между уровнями с одинаковыми индексами n ("межзонные" пере-

ходы), а сам матричный элемент совпадает с соответствующим выражением (3.15) для v_z . В конфигурации Фарадея, когда свет распространяется вдоль магнитного поля, имеет смысл говорить о правой и левой циркулярных поляризациях в плоскости пленки. В этом случае разрешены переходы между уровнями Ландау с номерами n и $n' = n \pm 1$, причем для переходов с увеличением номера n активна правая поляризация, а для переходов с уменьшением n — левая. При этом возможны переходы как "межзонные", так и "внутризонные".

Отметим в заключение, что оператор (3.28) коммутирует и с общим гамильтонианом

$$\hat{H}\hat{\Psi} = [\gamma^0 \gamma^3 \pi + \gamma^0 \Delta(z) + i\gamma^3 u(z) + G(z)] \hat{\Psi} = E\hat{\Psi}, \quad (3.35)$$

откуда следует, что во всех рассмотренных выше случаях магнитное поле приводит к стандартному расщеплению спектра на уровни Ландау.

4. Дву- и трехмерные неоднородные структуры

4.1. Локализованные состояния вблизи линейных и точечных дефектов

Ниже мы рассмотрим особенности двумерных структур, причем наличие поляризации учитывать не будем. Как известно [19, 20], деформация и механическое напряжение вблизи линейных и точечных дефектов спадает обратно пропорционально расстоянию от этих дефектов. Поэтому, для описания спектра узкощелевых полупроводников при наличии в них упомянутых дефектов пространственную зависимость потенциалов $\Delta(r) = \Delta_0 f(r) + \Delta_1$ и $G(r) = g_0 f(r)$ можно выбрать в виде $f(r) = 1/r$. В разделе 5.2 Приложения показано, что именно в этом, и только в этом случае, соответствующий гамильтониан приводится к суперсимметричному виду. При этом условия вещественности суперпотенциала и нормируемости волновой функции нулевой моды имеют вид

$$M^2 + \Delta_0^2 - g_0^2 > 0, \quad (4.1)$$

$$\Delta_0 \Delta_1 + E g_0 < 0, \quad (4.2)$$

где $M = 1/2, 3/2, \dots$ в случае линейного дефекта, и $M = 1, 2, \dots = (j + 1/2)$ в случае точечного дефекта (M — проекция углового момента на ось z , j — полный угловой момент). Из выражений (4.1) и (4.2) очевидно, что при $g_0 \neq 0$ вблизи таких дефектов локализованные состояния (как электронов, так и дырок) могут возникать независимо от того, инвертированы зоны полупроводника или нет. Заметим также, что при $\Delta_0 = 0$ выражение (5.46) для спектра в трехмерном случае ($p_z = 0$) совпадает с известным выражением для локализованных состояний вблизи точечного заряженного центра, полученным в работе [21] для двухзонных полупроводников

$$E_n^{\pm} = -\text{sign}(g_0) \frac{(c + n)\Delta_1}{\sqrt{(c + n)^2 + g_0^2}}, \quad c = \sqrt{k^2 - g_0^2}, \quad (4.3)$$

где роль эффективного заряда играет величина g_0 , а условие (4.2) эквивалентно условию захвата одним и тем же центром и электронов, и дырок.

4.2. Приграничные состояния в дву- и трехмерных квантовых ямах

Если пространственная зависимость полей отличается от $1/r$, то диагонализация гамильтониана невозможна и приходится применять другие методы. Например, для случая прямоугольной цилиндрической ямы радиусом a функция $f(\rho)$ равна

$$f(\rho) = (\mu + 1)\theta(\rho - a) - 1, \quad (4.4)$$

где параметр μ определяет глубину ямы. В этом случае соответствующее уравнение (5.10) можно решать в каждой области отдельно, учитывая, что на границе раздела производная волновой функции $\hat{\chi}_{\mp}(\rho)$ испытывает скачок

$$\left. \frac{d\hat{\chi}_{\mp}}{d\rho} \right|_{\rho=a^+} - \left. \frac{d\hat{\chi}_{\mp}}{d\rho} \right|_{\rho=a^-} = \mp(\mu + 1)\sqrt{A_0^2 - g_0^2} \hat{\sigma}_1 \hat{\chi}_{\mp}(a). \quad (4.5)$$

В результате получается следующее дисперсионное уравнение [22]:

$$\frac{q_e q_i}{(\mu + 1)^2 (A_0^2 - g_0^2) - q_e^2 - q_i^2} = \frac{I_m(q_i a) I_{m+1}(q_i a) K_m(q_e a) K_{m+1}(q_e a)}{I_{m+1}^2(q_i a) K_m^2(q_e a) + I_m^2(q_i a) K_{m+1}^2(q_e a)}, \quad (4.6)$$

где $q_i^2 = (A_0 - A_1)^2 - (E + g_0)^2 + p_z^2$, $q_e^2 = (\mu A_0 + A_1)^2 - (E - \mu g_0)^2 + p_z^2$ и $m = (M - 1/2)$; $I_m(q_i a)$, $K_m(q_e a)$ — модифицированные функции Бесселя 1-го и 2-го рода.

Для простоты рассмотрим случай $A_1 = g_0 = 0$ и $q_e^2 = q_i^2 + (\mu^2 - 1)A_0^2$. Отметим, что вещественные значения q_i отвечают уровням, локализованным на границе цилиндра, мнимые значения q_i при вещественных q_e — уровням размерного квантования внутри цилиндра, а мнимые значения $q_{i,e}$ — делокализованным состояниям непрерывного спектра. При вещественных значениях q_i правая часть уравнения (4.6) положительна. Левая же часть, равная в данном случае $q_i[q_i^2 + (\mu^2 - 1)A_0^2]^{1/2}/2 \times [(\mu + 1)A_0^2 - q_i^2]$, положительна только при $\mu > 0$. Отсюда следует, что приграничные состояния в цилиндрической квантовой яме возникают только в том случае, когда зоны полупроводников внутри и вне ямы взаимно инвертированы.

В простейшем случае "симметричной" ямы ($\mu = 1$, $q_i = q_e = q$) дисперсионное уравнение (4.6) приобретает вид

$$\frac{q^2}{4A_0^2} = \frac{I_m(qa)I_{m+1}(qa)K_m(qa)K_{m+1}(qa)}{[I_{m+1}(qa)K_m(qa) + I_m(qa)K_{m+1}(qa)]^2}. \quad (4.7)$$

При $a \rightarrow \infty$ решением (4.7) является $q = A_0$ и $E = \mp p_z$, т.е. задача становится эквивалентной одномерному инверсному контакту [23] и нулевая мода оказывается бесконечно-кратно вырожденной по проекциям полного углового момента M на ось z . При уменьшении радиуса ямы вырождение по m , отвечающее различным по модулю значениям M снимается, и двукратно вырожденный спектр локализованных состояний становится щелевым

$$E = \pm \sqrt{A_0^2 + p_z^2 - q^2}. \quad (4.8)$$

Число уровней внутри щели определяется максимальным значением углового момента, равного

$$2|M|_{\max} = \sqrt{1 + 4A_0^2 a^2}. \quad (4.9)$$

Уровни с большим значением M попадают в непрерывный спектр. Очевидно, что существует критическое значение радиуса $a_c = 1/\sqrt{8} A_0$, при котором все уровни внутри щели выталкиваются в непрерывный спектр и локализованные состояния отсутствуют.

Заметим, что малое изменение формы ямы, например, переход от круговой формы к эллиптической, приводит лишь к небольшому сдвигу энергетических уровней, что подтверждается расчетом с помощью теории возмущений по малому значению эксцентриситета эллипса. Все уровни, по-прежнему, остаются двукратно вырожденными. При этом, если площадь "деформированного" в эллипс круга не меняется, то и сдвига уровней тоже не происходит.

Для трехмерной сферически симметричной квантовой ямы анализ дисперсионного уравнения проводится точно так же. При конечных радиусах ямы спектр локализованных на границе состояний представляет собой набор дискретных уровней, кратность вырождения которых равна $2N$, где N — число различных проекций полного углового момента на ось z . Как и в предыдущем случае, существует критическое значение радиуса, при котором все локализованные уровни выталкиваются в непрерывный спектр.

5. Приложение. Методы факторизации и суперсимметрии в применении к решению уравнения Дирака

5.1. Одномерный случай

Применим методы факторизации [24] и суперсимметрии [10] к решению уравнения Дирака при наличии одномерных скалярных $A(z)$, аксиальных $u(z)$ и векторных $A^\mu = (0, 0, 0, G(z))$ потенциалов

$$\hat{H}\hat{\Psi} = \{v\gamma^0\hat{\gamma}\hat{\mathbf{p}} + \gamma^0 A(z) + i\gamma^3 u(z) + G(z)\}\hat{\Psi} = E\hat{\Psi}. \quad (5.1)$$

Волновую функцию $\hat{\Psi}$ можно выбрать в виде $\hat{\Psi} = \hat{\Psi}(z) \exp(i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r})$, где $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y, 0)$. Тогда вместо (5.1) получим

$$\hat{H}\hat{\Psi} = \{v\gamma^0\gamma^3\hat{p}_z + v\gamma^0(\gamma\mathbf{k}_\perp) + \gamma^0 A(z) + i\gamma^3 u(z) + G(z)\}\hat{\Psi} = E\hat{\Psi}. \quad (5.2)$$

Можно убедиться, что с гамильтонианом \hat{H} коммутирует оператор псевдочетности \hat{P} [14]

$$\hat{P} = \gamma^5(\gamma\mathbf{l}) = \frac{i\gamma^0\gamma^3(\gamma\mathbf{k}_\perp)}{k_\perp}, \quad (5.3)$$

где \mathbf{l} — единичный вектор в плоскости (x, y) , перпендикулярный волновому вектору \mathbf{k}_\perp : $\mathbf{l} = [\mathbf{n} \times \mathbf{k}_\perp]/|\mathbf{k}_\perp|$ (\mathbf{n} — единичный вектор вдоль оси z). Собственные значения оператора \hat{P} равны ± 1 . Заметим также, что с оператором \hat{P} связан и оператор проекции спина на направление \mathbf{l}

$$\hat{\Sigma}_l = (\hat{\Sigma} \times \mathbf{l}) = \gamma^0 \hat{P}. \quad (5.4)$$

В силу сказанного, в качестве волновой функции гамильтониана (5.2) можно выбрать собственные функции оператора \hat{P} , так что

$$\hat{P}\hat{\Psi}_\lambda(z) = \lambda\hat{\Psi}_\lambda(z), \quad (5.5)$$

и уравнение для $\hat{\Psi}_\lambda$ приобретает вид

$$\{\gamma^0[\gamma^3\hat{p}_z + A(z)] + i\gamma^3[u(z) - \lambda k_\perp] + G(z) - E\}\hat{\Psi}_\lambda = 0. \quad (5.6)$$

После квадрирования этого уравнения получим

$$\{\hat{p}_z^2 + A^2(z) + [u(z) - \lambda k_\perp]^2 - [E - G(z)]^2 + i\frac{d}{dz}[\gamma^3 A(z) - \gamma^0 \gamma^3 G(z) + i\gamma^0 u(z)]\}\hat{\Psi}_\lambda = 0. \quad (5.7)$$

Матричную часть этого уравнения можно диагонализировать только в том случае, если пространственная зависимость потенциалов A , G и u определяется одной и той же функцией $f(z)$

$$A(z) = A_1 + A_0 f(z), \quad u(z) = u_1 + u_0 f(z), \quad G(z) = g_0 f(z). \quad (5.8)$$

Такая диагонализация осуществляется с помощью канонического преобразования $\hat{\Psi} = \hat{S}\hat{\chi}$, где

$$\hat{S} = \exp\left(\frac{\alpha\gamma^0}{2}\right) \exp\left(\frac{i\beta\gamma^0\gamma^3}{2}\right), \quad \text{th}(\alpha) = \frac{g_0}{A_0}, \quad \tan(\beta) = \frac{u_0}{\sqrt{A_0^2 - g_0^2}}. \quad (5.9)$$

В результате уравнение (5.7) приобретает следующий вид

$$\hat{H}_s \hat{\chi}_\lambda = \left[\hat{p}_z^2 + W_\lambda^2 - i\gamma^3 \frac{dW_\lambda}{dz}\right] \hat{\chi}_\lambda = E^2 \hat{\chi}_\lambda \equiv E_s \hat{\chi}_\lambda, \quad (5.10)$$

где

$$W_\lambda(z) = w_\lambda + \kappa f(z), \quad (5.11)$$

$$E_s = e^2 = E^2 - A_1^2 - (u_1 - \lambda k_\perp)^2 + w_\lambda^2, \quad (5.12)$$

и $w_\lambda = [A_1 A_0 + (u_1 - \lambda k_\perp)u_0 + E g_0]/\kappa$, $\kappa = \sqrt{A_0^2 + u_0^2 - g_0^2}$.

Гамильтониан (5.10) обладает специфической симметрией, обусловленной специальным видом потенциальной энергии, представляющим собой сумму квадрата и производной одной и той же функции $W_\lambda(z)$. Это становится очевидным, если представить \hat{H}_s в виде

$$\hat{H}_s = Q_+ Q_- + Q_- Q_+, \quad (5.13)$$

где

$$Q_+ = B^- S^+, \quad Q_- = B^+ S^-, \quad B^\pm = (\mp i\hat{p}_z + W_\lambda), \quad S^\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma^\pm & 0 \\ 0 & \sigma^\pm \end{pmatrix}, \quad \sigma^\pm = \sigma_1 \pm i\sigma_2. \quad (5.14)$$

Здесь B^\pm — бозе-операторы, которые в общем случае описывают "взаимодействующие бозоны" [10], а операторы S^\pm подчиняются фермиевским перестановочным соотношениям и обладают свойством нильпотентности

$(S^\pm)^2 = 0$. Вследствие этого можно убедиться, что операторы Q_\pm коммутируют с гамильтонианом: $[\hat{H}_s, Q_\pm] = 0$. Это свидетельствует об инвариантности гамильтониана \hat{H}_s относительно преобразований, осуществляемых операторами Q_\pm , т.е. преобразований замены бозона на фермион и наоборот. Следовательно, гамильтониан \hat{H}_s является гамильтонианом суперсимметричной механики Виттена [25].

Чтобы рассмотреть вопрос об основном состоянии гамильтониана, представим его в матричном виде:

$$\hat{H}_s = \begin{bmatrix} H_+ & & 0 \\ & H_- & \\ 0 & & H_- \\ & & & H_+ \end{bmatrix}, \quad (5.15)$$

где

$$H_+ = B^- B^+ = \hat{p}_z^2 + U_+(z), \quad H_- = B^+ B^- = \hat{p}_z^2 + U_-(z), \quad U_\pm = W^2(z) + W'(z). \quad (5.16)$$

Гамильтонианы H_\pm действуют в пространстве однокомпонентных волновых функций, причем каждый из них факторизован, т.е. имеет вид произведения двух сопряженных друг другу дифференциальных операторов первого порядка. Благодаря этому задача определения состояний с нулевой энергией сводится к нахождению решений уравнений $B^+ \hat{\chi}^+ = 0$ или $B^- \hat{\chi}^- = 0$.

Пользуясь выражением (5.14) для операторов B^\pm , запишем уравнения $B^\pm \hat{\chi}^\pm = 0$ в виде

$$\left[\frac{d}{dz} \pm W(z)\right] \hat{\chi}^\pm = 0. \quad (5.17)$$

Решения этих уравнений имеют вид

$$\hat{\chi}^\pm = c \exp \left[\pm \int_0^z W(x) dx \right]. \quad (5.18)$$

Но, поскольку $\hat{\chi}^\pm$ являются собственными функциями гамильтониана \hat{H}_s , то они должны быть квадратично интегрируемыми. Для этого, согласно (5.18), необходимо, чтобы выполнялись условия

$$\int_0^z W(x) dx \rightarrow \mp \infty \quad \text{при } |z| \rightarrow \infty, \quad (5.19)$$

где знаки $(-)$ и $(+)$ в правой части (5.19) соответствуют функциям $\hat{\chi}^+$ и $\hat{\chi}^-$.

Условия (5.19) несовместимы, поэтому только одна из функций $\hat{\chi}^\pm$ может быть нормируемой. Таким образом, если состояние с энергией $E_s = 0$ ("нулевая мода") существует, то оно невырождено и этому состоянию отвечает та из функций $\hat{\chi}^\pm$, которая является нормируемой (т.е. спинорная часть волновой функции, соответствующей нулевой моде, имеет структуру либо $(1 \ 0 \ 0 \ 1)$, либо $(0 \ 1 \ 0 \ 0)$). Однако может оказаться, что ни одна из этих функций не нормируема.

Заметим, что гамильтониан \hat{H}_s можно представить в виде квадрата эрмитовых операторов Q_1 и Q_2

$$Q_1 = Q_+ + Q_-, \quad Q_2 = -i(Q_+ - Q_-). \quad (5.20)$$

Операторы Q_1 , Q_2 и \hat{H}_s удовлетворяют алгебре

$$\{Q_i, Q_k\} = 2\delta_{ik}\hat{H}_s, \quad [Q_i, \hat{H}_s] = 0, \quad i, k = 1, 2, \quad (5.21)$$

включающей как соотношения коммутации, так и соотношения антикоммутации (так называемая супералгебра Ли). Благодаря этому спектр гамильтониана \hat{H}_s неотрицателен, причем уровни с $E_s \neq 0$ являются двукратно вырожденными. Таким образом, гамильтонианы \hat{H}_\pm имеют почти одинаковый спектр при произвольной функции $W(z)$. Разница состоит лишь в том, что один из гамильтонианов H_\pm имеет нижний уровень, энергия которого равна нулю, а второй такого уровня не имеет [26, 27]. Из формулы (5.12) тогда следует, что в этом случае мы имеем решение для основного состояния гамильтониана (5.1).

Чтобы найти полный спектр, следуя работам [28, 29], воспользуемся двумя свойствами суперсимметричных теорий: вырождением спектра и равенством нулю энергии основного состояния.

Пусть, для определенности, нулевым уровнем обладает гамильтониан H_- . Если потенциалы U_\pm отличаются только значениями входящих в них параметров, включая аддитивную константу, то полный спектр H_\pm , а следовательно, и суперсимметричного гамильтониана \hat{H}_s , может быть легко найден. Действительно, пусть

$$U_+(\alpha, z) = U_-(\alpha_1, z) + Q(\alpha_1), \quad (5.22)$$

где α — совокупность всех параметров и α_1 — некоторая функция от α [$\alpha_1 = f(\alpha)$], вид которой определяется потенциалами. Построим серию гамильтонианов H_n , $n = 0, 1, 2, \dots$

$$H_n = \hat{p}_z^2 + U_-(\alpha_n, z) + \sum_{k=1}^n Q(\alpha_k), \quad (5.23)$$

где α_n — результат n -кратного применения функции f , и сравним спектры H_n и H_{n+1} . Пользуясь соотношением (5.22), получим

$$H_{n+1} = \hat{p}_z^2 + U_+(\alpha_n, z) + \sum_{k=1}^n Q(\alpha_k). \quad (5.24)$$

Как уже отмечалось, H_n и H_{n+1} имеют одинаковые спектры за исключением нижнего уровня H_n (энергия которого равна $\sum_{k=1}^n Q(\alpha_k)$). Переходя от H_n к H_{n+1} и т.д., получим исходный гамильтониан H_- , нижний уровень которого отвечает нулевой энергии, а все остальные уровни совпадают с нижними уровнями гамильтонианов H_n . Таким образом, полный спектр H_- дается формулой $\tilde{E}_n = \sum_{k=1}^n Q(\alpha_k)$. Следовательно, спектр гамильтониана с потенциалом $U(\alpha, z) = U_-(\alpha, z) + Q_0(\alpha)$ имеет вид [28]

$$E_s^n = \tilde{E}_n + Q_0(\alpha) = \sum_{k=1}^n Q(\alpha_k) + Q_0(\alpha). \quad (5.25)$$

Для потенциалов U_\pm , удовлетворяющих условию (5.22), соответствующая функция $W(\alpha, z)$ удовлетворяет функционально-дифференциальному уравнению

$$\begin{aligned} W^2(\alpha, z) + \frac{d}{dz} W(\alpha, z) = \\ = W^2(\alpha_1, z) - \frac{d}{dz} W(\alpha_1, z) + 2Q(\alpha_1). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Таким образом, спектры гамильтонианов H_\pm , а вместе с ними и спектр \hat{H}_s , могут быть легко найдены исходя из решения уравнения (5.26) и выражаются формулой (5.25).

Применение метода суперсимметрии к исследованию полного спектра гамильтониана (5.6) рассмотрим на примере следующей пространственной зависимости полей (5.8)

$$f(z) = \text{th}\left(\frac{z}{l}\right). \quad (5.27)$$

Подставляя (5.27) в (5.8), (5.11) и (5.16), получим

$$U_\pm = \frac{1}{l^2} a(a \pm 1) \text{th}^2\left(\frac{z}{l}\right) + 2ab \text{th}\left(\frac{z}{l}\right) + l^2 b^2 \pm \frac{a^2}{l^2}, \quad (5.28)$$

где $a = \kappa/l = l/l_0$, $b = [A_1 A_0 + (u_1 - \lambda k_\perp)u_0 + E g_0](l_0/l)$ и $l_0 = 1/\kappa$ — длина локализации волновой функции. Воспользовавшись последовательно формулами (5.22)–(5.25), имеем ($a_1 = a - 1$, $a_n = a - n$, $b_n = ab/a_n$, $Q_k = l^2(b_{k-1}^2 - b_k^2) + (2a + 1 - 2k)/l^2$, $Q_0(a) \equiv 0$)

$$E_s^n = \sum_{k=1}^n Q_k = l^2(b^2 - b_n^2) + \frac{n(2a - n)}{l^2}. \quad (5.29)$$

И наконец, подставляя (5.29) в (5.12), находим общий спектр локализованных состояний гамильтониана (5.1) (двукратно вырожденная "дираковская" ветвь спектра)

$$\begin{aligned} E^\pm = \frac{1}{g_0^2 l^2 + (n - l/l_0)} \times \\ \times \left\{ -g_0 l^2 \left[A_1 A_0 + (u_1 - \lambda k_\perp)u_0 \pm \left(-n + \frac{l}{l_0} \right) \right] \times \right. \\ \times \left[\left(g_0^2 l^2 + \left(n - \frac{l}{l_0} \right) \right)^2 \left(A_1^2 + (u_1 - \lambda k_\perp)^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{n(n - 2l/l_0)}{l^2} \right) - (A_1 A_0 + (u_1 - \lambda k_\perp)u_0)^2 \right]^{1/2} \Big\}, \end{aligned} \quad (5.30)$$

где $n = m + (1 + \lambda)/2$ и $m = 0, 1, 2, \dots$

5.2. Многомерный случай

Применение метода суперсимметрии к исследованию спектра гамильтониана (5.1) можно распространить и на многомерный случай. Когда потенциалы, входящие в гамильтониан, зависят только от вектора $\mathbf{p} = (x, y, 0)$, то волновую функцию можно выбрать в виде $\hat{\Psi} = \hat{\Psi}(\mathbf{p}) \exp(ip_z z)$ и уравнение (5.1) (при $u = 0$), записанное в цилиндрической системе координат, приобретает вид

$$[\hat{\gamma}^0(\hat{\gamma}^i \hat{p}_i) + \hat{\gamma}^0 \Delta(\mathbf{p}) + G(\mathbf{p})] \hat{\Psi}(\mathbf{p}) = E \hat{\Psi}(\mathbf{p}), \quad (5.31)$$

где

$$\hat{\gamma}^\mu = h^\mu_\nu \gamma^\nu, \quad h = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.32)$$

$\hat{\mathbf{p}} = (-i\partial_\rho, -i\partial_\varphi/\rho, p_z)$. Далее, если Δ и G зависят только от $|\rho|$ (цилиндрическая симметрия), то в

уравнении (5.31) можно избавиться от угловых переменных с помощью неунитарного преобразования $\hat{\Psi}(\rho) = \hat{S}\hat{\Phi}(\rho) = \sqrt{\rho} \exp(\gamma^0 \gamma^1 \varphi/2) \hat{\Phi}(\rho)$. При этом уравнение для $\hat{\Phi}(\rho)$ имеет вид

$$\left[\gamma^0 \gamma^1 \hat{p}_\rho + \gamma^0 \gamma^2 \frac{M}{\rho} + \gamma^0 \gamma^3 p_z + \gamma^0 \Delta(\rho) + G(\rho) \right] \hat{\Phi}(\rho) = E \hat{\Phi}(\rho), \quad (5.33)$$

где $\hat{\Phi} = \Phi(\rho) \exp(iM\varphi)$ и $M = \pm(1/2), \pm(3/2), \dots$ в силу условия $\hat{\Psi}(\varphi + 2\pi) = \hat{\Psi}(\varphi)$. Теперь, если координатная зависимость Δ и G определяется одной и той же функцией $f(\rho)$, а именно

$$\Delta(\rho) = \Delta_0 f(\rho) + \Delta_1, \quad G(\rho) = g_0 f(\rho), \quad (5.34)$$

то с помощью канонического преобразования $\hat{\Phi} = \hat{S}_0 \hat{\chi} = \exp(\gamma^0 \omega/2) \hat{\chi}$, где $\tan(\omega) = -g_0/\Delta_0$, уравнение (5.33) можно привести к виду

$$\left\{ \gamma^0 [\gamma^1 \hat{p}_\rho + w(\rho)] + \gamma^0 \gamma^2 \frac{M}{\rho} + \gamma^0 \gamma^3 p_z \right\} \hat{\chi}(\rho) = \tilde{E} \hat{\chi}(\rho), \quad (5.35)$$

где

$$w(\rho) = \sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2} f(\rho) + \frac{\Delta_0 \Delta_1 + E g_0}{\sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2}}, \quad \tilde{E} = \frac{g_0 \Delta_1 + E \Delta_0}{\sqrt{\Delta_0^2 - g_0^2}}. \quad (5.36)$$

В результате квадрирования уравнения (5.35) получим ($\hat{\chi}$ — столбец из спиноров χ_- и χ_+):

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 \hat{\chi}_\pm(\rho) &\equiv \left\{ \hat{p}_\rho^2 + \frac{M^2}{\rho^2} - \sigma_3 \frac{M}{\rho^2} + w^2(\rho) \mp \sigma_1 \frac{dw}{d\rho} \right\} \hat{\chi}_\mp = \\ &= (\tilde{E}^2 - p_z^2) \hat{\chi}_\mp. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Заметим, что гамильтониан \hat{H}_1 является гамильтонианом суперсимметричной квантовой механики

$$\hat{H} \hat{\chi} = \left[\hat{p}_\rho^2 + \hat{V}^2 + \frac{d\hat{V}}{d\rho} \right] \hat{\chi} = (E^2 - p_z^2) \hat{\chi} = E_s \hat{\chi} \quad (5.38)$$

с матричным потенциалом

$$\hat{V}(\rho) = \Sigma_3 \frac{M}{\rho} + i \gamma^2 w(\rho). \quad (5.39)$$

При этом "суперзаряды" \hat{Q}^\pm определяются следующим образом

$$\hat{Q}^\pm \equiv [\mp \hat{p}_\rho + \hat{V}(\rho)]. \quad (5.40)$$

Нетрудно убедиться, что уравнение (5.38) может быть диагонализировано только в том случае, когда $f(\rho) = 1/\rho$. С помощью преобразования $\hat{\chi}(\rho) = \exp(\gamma^2 \omega_2/2) \eta(\rho)$, где $\tan(\omega_2) = (\Delta_0^2 - g_0^2)^{1/2}/M$, уравнение (5.38) можно привести к следующему виду

$$\hat{H}_s^{\text{ef}} \eta(\rho) = [\hat{p}_\rho^2 + W^2(\rho) - \hat{\Sigma}_3 W'(\rho)] \eta(\rho) = \tilde{E}_s^2 \eta(\rho), \quad (5.41)$$

где

$$W(\rho) = \frac{\sqrt{M^2 + \Delta_0^2 - g_0^2}}{\rho} + \frac{\Delta_0 \Delta_1 + E g_0}{\sqrt{M^2 + \Delta_0^2 - g_0^2}} \equiv \frac{c}{\rho} - d, \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_s^2 &= E^2 + \frac{(\Delta_0 \Delta_1 + E g_0)^2}{M^2 + \Delta_0^2 - g_0^2} - \Delta_1^2 - p_z^2 = \\ &= E^2 - \Delta_1^2 - p_z^2 + d^2, \end{aligned} \quad (5.43)$$

и $\hat{\Sigma}_3$ — третья компонента оператора спина. Тогда из общих теорем суперсимметричной механики [10] приходим к выводу, что для существования нулевой моды гамильтониана (5.41) должно выполняться следующее соотношение

$$\Delta_0 \Delta_1 + E g_0 < 0. \quad (5.44)$$

Энергия основного состояния (5.33) определяется из уравнения $\tilde{E}_s = 0$. Отметим также, что уравнение (5.41) по форме совпадает с уравнением Шрёдингера суперсимметричной квантовой механики для движения частицы в кулоновском поле [29] (здесь роль орбитального момента l играет величина $(M^2 + \Delta_0^2 - g_0^2)^{1/2}$), спектр которого известен. Воспользовавшись результатами предыдущего пункта (уравнения (5.22)–(5.25)) можно написать общий спектр локализованных (вблизи $\rho_n = (c+n)^2/cd$, где $n = 0, 1, 2, \dots$) состояний гамильтониана (5.33)

$$\begin{aligned} E_n^\pm &= \frac{g_0 \Delta_0 \Delta_1}{(c+n)^2 + g_0^2} \left[-1 \pm \frac{c+n}{g_0 \Delta_1 \Delta_0} \times \right. \\ &\quad \left. \times \sqrt{[g_0^2 + (c+n)^2](\Delta_1^2 + p_z^2) - \Delta_1^2 \Delta_0^2} \right]. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Отметим, что при $p_z = 0$ и $\Delta_0 = 0$ из выражения (5.45) получается известный спектр кулоновских состояний для трехмерных полей

$$E_n^\pm = -\text{sign}(g_0) \frac{(c+n) \Delta_1}{\sqrt{(c+n)^2 + g_0^2}}, \quad c = \sqrt{k^2 - q^2}. \quad (5.46)$$

Здесь g_0 играет роль константы взаимодействия. В самом деле, для трехмерных сферически-симметричных потенциалов $\Delta(r)$ и $G(r)$ гамильтониан (5.1) коммутирует с оператором

$$\hat{K} = \gamma^0 (\hat{\mathbf{g}} \hat{\mathbf{L}} + 1), \quad (5.47)$$

собственные значения которого $k = \mp(j+1/2) = \mp 1, \mp 2, \dots$. Здесь $\hat{\mathbf{L}}$ — оператор орбитального момента, j — полный угловой момент электрона. Поэтому в качестве волновых функций (5.1) можно выбрать собственные функции оператора \hat{K} , так что $\hat{K} \hat{\Psi}(r) = k \hat{\Psi}(r)$, где $\hat{\Psi} = (1/r) \hat{\Phi}(r)$, и для определения функции $\hat{\Phi}(r)$ получим следующее уравнение

$$\left[\tau_2 \hat{p}_r + \frac{k}{r} \tau_1 + \tau_3 \Delta(r) + G(r) \right] \hat{\Phi}(r) = E \hat{\Phi}(r), \quad (5.48)$$

где $\hat{p}_r = -i\partial_r$, а τ_1, τ_2, τ_3 — матрицы Паули. Проквадрилировав уравнение (5.48), получим

$$\left\{ \hat{p}_r^2 + \frac{k^2}{r^2} + \tau_3 \frac{k}{r^2} + \frac{d}{dr} [\tau_1 A(r) + i\tau_2 G(r)] - [E - G(r)]^2 \right\} \hat{\Phi} = 0. \quad (5.49)$$

Нетрудно убедиться, что при одинаковой пространственной зависимости A и G (выражения (5.34) с заменой ρ на r) с помощью неунитарного преобразования $\hat{\Phi}(r) = \exp(\tau_3 \beta/2) \hat{\chi}(r)$, где $\text{th}(\beta) = g_0/\Delta_0$, уравнение (5.49) можно привести к виду

$$\left\{ \hat{p}_r^2 + \frac{k^2}{r^2} + \tau_3 \frac{k}{r^2} + w^2(r) \mp \tau_1 \frac{dw}{dr} \right\} \hat{\chi} = \tilde{E}^2 \hat{\chi}, \quad (5.50)$$

где выражения для $w(r)$ и \tilde{E} такие же, что и (5.36) с точностью до замены ρ на r . Сравнение уравнений (5.37) и (5.50) показывает, что все дальнейшие рассуждения относительно решений (5.37) обобщаются на трехмерный случай с учетом замены ρ на r , M на $-k$ и $p_z = 0$.

Список литературы

1. Pankratov O A, Volkov B A, in *Soviet Scientific Reviews A* (Ed. I M Khalatnikov) **9** 355 (1987)
2. Волков Б А, Панкратов О А *Письма в ЖЭТФ* **42** 145 (1985)
3. Pankratov O A, Pakhomov S V, Volkov B A *Sol. St. Commun.* **61** 93 (1987)
4. Волков Б А, Панкратов О А *Письма в ЖЭТФ* **43** 99 (1986)
5. Nimitz G, Schlicht B, Dornhaus R *Springer Tracts in Modern Physics* **98** (Berlin: Springer, 1983)
6. Lee V G *Phys. Rev. B* **34** 5430 (1986)
7. Coltsos W G, Nurmico A V, Partin D L *Sol. State Commun.* **59** 183 (1986)
8. Pankratov O A *Phys. Lett. A* **121** 360 (1987)
9. Идлис Б Г, Мусаханов М М, Усманов М Ш *ТМФ* **101** 47 (1994)
10. Генденштейн Л Э, Криве И В *УФН* **146** 553 (1985)
11. Райчев О Э *ФТП* **23** 1226 (1989)
12. Каннер В Г, Малкова Н М *Письма в ЖЭТФ* **54** 388 (1991)
13. Pankratov O A, Volkov B A, in *Landau Level Spectroscopy* (Eds Landwehr, E I Rashba) (Elsevier Science Publishers B.V., 1991) Chap. 14, p. 818
14. Идлис Б Г, Усманов М Ш *ФТП* **26** 329 (1992)
15. Korenman V, Drew H D *Phys. Rev. B* **35** 6446 (1987)
16. Agassi D, Korenman V *Phys. Rev. B* **37** 10095 (1988)
17. Волков Б А, Пинскер Т Н *ФТТ* **23** 1756 (1981)
18. Идлис Б Г, Усманов М Ш *Письма в ЖЭТФ* **56** 268 (1992)
19. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Теория упругости* (М.: Наука, 1987)
20. Косевич А М *Дислокации в теории упругости* (Киев: Наукова Думка, 1978)
21. Келдыш Л В *ЖЭТФ* **45** 364 (1963)
22. Идлис Б Г, Усманов М Ш *ФТП* **28** 767 (1994)
23. Эфрос Ал Л, Эфрос А Л *ФТП* **16** 1209 (1982)
24. Infeld L, Hull T E *Rev. Mod. Phys.* **23** 21 (1951)
25. Witten E *Nucl. Phys. C* **188** 513 (1981)
26. Андрианов А А, Борисов Н В, Иоффе М В *Письма в ЖЭТФ* **39** 78 (1984)
27. Андрианов А А, Борисов Н В, Иоффе М В *ТМФ* **61** 183 (1984)
28. Генденштейн Л Э *Письма в ЖЭТФ* **38** 299 (1983)
29. Sukumar C V *J. Phys. A. Math. Gen.* **18** 257 (1985)

INTERFACE STATES IN INHOMOGENEOUS SEMICONDUCTOR STRUCTURES

B.A. Volkov, B.G. Idlis, M.Sh. Usmanov

*P.N. Lebedev Physics Institute, Russian Academy of Sciences
Leninskii pr. 53, 117924 Moscow, Russia
Tel. (7-095) 135-73 44*

In this review the generation and spectrum of localized electron states in the different inhomogeneous structure formed by narrow-gap semiconductors with self-inverted bands are considered. The consideration is based on applying the methods of supersymmetry and factorization to solution of the Dirac-type equation with inhomogeneous external potentials for one-, two- and three-dimensional systems

PACS numbers: **71.90.+q, 73.40.-c, 03.65.Pm**

Bibliography — 29 references

Received 28 April 1995