

СВЯЗАННОЕ СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В МДП-СТРУКТУРЕ, ОБУСЛОВЛЕННОЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

*М. М. Махмудиан**, *А. В. Чаплик***

*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

*Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 13 июля 2018 г.

Показано, что два электрона, находящиеся в квантовой яме вблизи металлического электрода, притягиваются друг к другу за счет спин-орбитального взаимодействия типа Бычкова–Рашба и сил электростатического изображения. При вполне достижимых значениях характеристических параметров системы эффективное притяжение, вызванное спин-орбитальным взаимодействием, превалирует над кулоновским отталкиванием, и становится возможным образование биэлектрона. Теория эффекта особенно проста и наглядна для квантовой проволоки. Энергия связи электронной пары существенно увеличивается при приложении затворного напряжения соответствующей полярности.

DOI: 10.1134/S0044451018120179

1. ВВЕДЕНИЕ

С начала 2000-х гг. в литературе неоднократно обсуждался вопрос о влиянии сил электростатического изображения в структурах типа МДП (MOS) с двумерным электронным газом на спин-орбитальное взаимодействие электронов [1–3]. В работе [3] показано, что квазиодномерная электронная система (квантовая проволока) может стать неустойчивой относительно флуктуаций плотности электронов благодаря вкладу сил изображения в металлическом электроде в спин-орбитальную энергию системы. В нашем кратком сообщении [4] на примере простой (и довольно грубой) модели мы показали, что такие силы могут при определенных условиях привести к образованию электронной пары — биэлектрона¹⁾ из-за преобладания эффективного притяжения в паре, вызванного спин-орбитальным взаимо-

действием (СОВ), над кулоновским отталкиванием. В предлагаемой работе приводится численное решение задачи с точными потенциалами. Кроме того, рассмотрен случай квантовой проволоки, для которой решение принимает особенно простой вид, а также учтено влияние полевого напряжения, которое при соответствующей полярности существенно облегчает образование связанного состояния.

Физическая картина обсуждаемого эффекта состоит в следующем. Как известно, в двумерной электронной системе, асимметричной в направлении своей нормали, существует СОВ типа Бычкова–Рашба, линейное по планарному импульсу. Это взаимодействие расщепляет дисперсию свободной частицы на две ветви, $E = p^2/2m \pm \alpha p$, где p — модуль двумерного импульса, m — эффективная масса, α — характеристическая для данной системы константа СОВ. Эта величина зависит от нормальной к плоскости системы компоненты электрического поля: $\alpha = AF_z$, где A не зависит от поля [7, 8]. В МДП-структуре требуется нарушение центросимметричности обеспечивается присутствием металлического электрода. В системе двух электронов действующее на каждый из них полное нормальное поле F_z (в дальнейшем индекс z опускаем) зависит от расстояния между частицами (рис. 1):

* E-mail: mahmood@isp.nsc.ru

** E-mail: chaplik@isp.nsc.ru

¹⁾ В работах, связанных с моделью Хаббарда, двухэлектронный комплекс называют дублоном (см., например, [5, 6]). Точнее, речь идет о состоянии с двумя электронами на одном узле решетки. Термин биэлектрон представляется нам более физичным; в узельной модели не приходится говорить, например, о размере пары, ее угловом моменте и т. п.

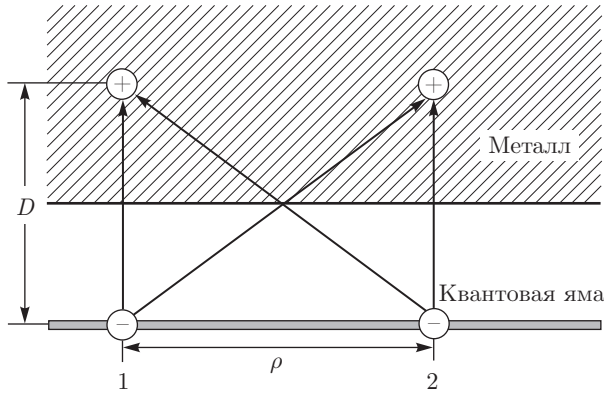


Рис. 1. Схематическое изображение структуры. Стрелки показывают направления сил, действующих на электроны

$$F = \frac{e}{\epsilon D^2} + \frac{eD}{\epsilon (D^2 + \rho^2)^{3/2}}, \quad \rho = |\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|. \quad (1)$$

Здесь ϵ — диэлектрическая постоянная, $D/2$ — расстояние от квантовой ямы до металла, ρ — расстояние между электронами. Это поле увеличивается с уменьшением ρ . Нижняя ветвь расщепленного спектра электрона имеет участок отрицательных значений E , наиболее глубокое из которых соответствует петле экстремумов: $E_{min} = -m\alpha^2/2$. Уменьшение ρ приводит к увеличению параметра α и, следовательно, к понижению энергии системы за счет СОВ, тогда как кулоновское отталкивание $e^2/\epsilon\rho - e^2/\epsilon\sqrt{\rho^2 + D^2}$ дает положительный вклад в энергию, также растущий при уменьшении ρ . Если баланс окажется отрицательным, то возникнет связанное состояние — биэлектрон. Очевидно, что соответствующий уровень энергии должен лежать ниже $-m\alpha^2$ — суммарной минимальной энергии двух электронов на бесконечно большом расстоянии.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Гамильтониан пары электронов в описанной выше структуре имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + AF\mathbf{n} \cdot ([\hat{\mathbf{p}}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_1] + [\hat{\mathbf{p}}_2 \times \boldsymbol{\sigma}_2]), \quad (2)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор нормали, $\boldsymbol{\sigma}_i$ — матрицы Паули,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \frac{2e^2}{\epsilon} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + D^2}} \right). \quad (3)$$

Здесь опущены не существенные для дальнейшего слагаемые, описывающие взаимодействие электро-

нов с собственными изображениями, однако вклады этого взаимодействия в F , разумеется, учтены²⁾.

Оператор \hat{H} действует на волновую функцию двух частиц со спином $1/2$, т.е. на биспинор $(\psi_1\psi_2\psi_3\psi_4)$. Каждая из матриц Паули в выражении (2) действует на «свой» спинор, (u_1u_2) или (v_1v_2) , а часть гамильтониана \hat{H}_0 подразумевается умноженной на единичную матрицу 4×4 . В спинорных компонентах гамильтониан (2) записывается как

$$\hat{H} = \hat{H}_0\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + AF\mathbf{n} \cdot ([\hat{\mathbf{p}}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}] \delta_{\gamma\delta} + [\hat{\mathbf{p}}_2 \times \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta}] \delta_{\alpha\beta}), \quad (4)$$

а искомую волновую функцию следует представить в виде $u_\beta v_\delta$. Свободными индексами, нумерующими четыре уравнения, выбираем α, γ ; компоненты ψ записываются в виде

$$\begin{aligned} \psi_1 &= u_1v_1, & \psi_2 &= u_1v_2, \\ \psi_3 &= u_2v_1, & \psi_4 &= u_2v_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Подчеркнем, что такая запись вовсе не означает, что двухчастичная функция $\psi(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ распадается на произведение функций, каждая из которых зависит лишь от $\boldsymbol{\rho}_1$ или $\boldsymbol{\rho}_2$. Соотношения (5) просто показывают, на какой спинор действуют матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma}_1$ и $\boldsymbol{\sigma}_2$. Система уравнений, соответствующая гамильтониану (4), имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_0\psi_1 + An \cdot \{F([\hat{\mathbf{p}}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_{12}]\psi_3 + [\hat{\mathbf{p}}_2 \times \boldsymbol{\sigma}_{12}]\psi_2)\} &= E\psi_1, \\ \hat{H}_0\psi_2 + An \cdot \{F([\hat{\mathbf{p}}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_{12}]\psi_4 + [\hat{\mathbf{p}}_2 \times \boldsymbol{\sigma}_{21}]\psi_1)\} &= E\psi_2, \\ \hat{H}_0\psi_3 + An \cdot \{F([\hat{\mathbf{p}}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_{21}]\psi_1 + [\hat{\mathbf{p}}_2 \times \boldsymbol{\sigma}_{12}]\psi_4)\} &= E\psi_3, \\ \hat{H}_0\psi_4 + An \cdot \{F([\hat{\mathbf{p}}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_{21}]\psi_2 + [\hat{\mathbf{p}}_2 \times \boldsymbol{\sigma}_{21}]\psi_3)\} &= E\psi_4. \end{aligned} \quad (6)$$

Фигурные скобки в выражениях (6) означают операцию эрмитизации:

$$\{\hat{Q}\hat{R}\} = \frac{1}{2}(\hat{Q}\hat{R} + \hat{R}\hat{Q}).$$

Дело в том, что из-за зависимости F от ρ операторы импульсов не коммутируют с F , так что гамильтонианы (2) и (4) не являются эрмитовыми.

Полезно посмотреть, как в пренебрежении взаимодействием между электронами из уравнений (6)

²⁾ Волновое уравнение с гамильтонианом (2) с учетом (3) вполне аналогично известному из квантовой электродинамики уравнению Брейта – Ландау.

получается энергия пары свободных частиц с учетом СОВ. Ищем решения в виде плоских волн (здесь и далее $\hbar = 1$)

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \exp(i\mathbf{p}_1 \cdot \boldsymbol{\rho}_1), \quad v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \exp(i\mathbf{p}_2 \cdot \boldsymbol{\rho}_2),$$

и легко находим детерминант 4×4 -системы линейных уравнений для ψ_i ($i = 1, \dots, 4$), записанных по схеме (5):

$$\begin{vmatrix} G & b_2^* & b_1^* & 0 \\ b_2 & G & 0 & b_1^* \\ b_1 & 0 & G & b_2^* \\ 0 & b_1 & b_2 & G \end{vmatrix} = 0, \quad (7)$$

$$G \equiv (p_1^2 + p_2^2) / 2m - E,$$

$$b_1 \equiv AF_0 (ip_{1x} - p_{1y}),$$

$$b_2 \equiv AF_0 (ip_{2x} - p_{2y}),$$

$$F_0 = e/\varepsilon D^2.$$

Отсюда следует дисперсионное уравнение

$$G^4 - 2G^2 (|b_1|^2 + |b_2|^2) + (|b_1|^2 - |b_2|^2)^2 = 0, \quad (8)$$

четыре корня которого равны

$$E = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} \pm \alpha_0 (p_1 \pm p_2). \quad (9)$$

Здесь $\alpha_0 = AF_0$ — константа СОВ свободного электрона (взаимодействует только с собственным изображением). Как и следовало, выражение (9) дает все четыре возможные комбинации ветвей дисперсии двух невзаимодействующих электронов.

Возвращаясь к предмету работы, перейдем в систему центра масс

$$\mathbf{R} = (\boldsymbol{\rho}_1 + \boldsymbol{\rho}_2)/2, \quad \boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2.$$

Поскольку в уравнениях (6) коэффициенты зависят лишь от $\boldsymbol{\rho}$, решение имеет вид $e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}} \psi(\boldsymbol{\rho})$. Рассматриваем далее покоящуюся как целое пару с суммарным импульсом $\mathbf{P} = 0$ и введем полярные координаты ρ и φ в плоскости двумерного вектора $\boldsymbol{\rho}$. В спин-орбитальных членах уравнений (6) фигурируют лишь комбинации

$$\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} = e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \pm \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

Очевидно, что наименьшему по энергии состоянию отвечает минимально возможное значение сохраняющегося полного (орбитальный + спиновый) момен-

та относительного движения в паре. Легко проверить, что такому состоянию соответствуют решения системы (6) вида

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \chi_1(\rho) e^{-i\varphi}, & \psi_2 &= \chi_2(\rho), \\ \psi_3 &= \chi_3(\rho), & \psi_4 &= \chi_4(\rho) e^{i\varphi}. \end{aligned} \quad (10)$$

После подстановки соотношений (10) в уравнения (6) переменная φ исключается, и мы приходим к системе уравнений для $\chi_i(\rho)$:

$$\begin{aligned} (\hat{T}_1 + V(\rho)) \chi_1 + AF(\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} (\chi_2 - \chi_3) + \\ + \frac{A}{2} (\chi_2 - \chi_3) \frac{\partial F}{\partial \rho} = E \chi_1, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} (\hat{T}_0 + V(\rho)) \chi_2 - AF(\rho) \left[\frac{\partial}{\partial \rho} (\chi_1 + \chi_4) + \right. \\ \left. + \frac{1}{\rho} (\chi_1 + \chi_4) \right] - \frac{A}{2} (\chi_1 + \chi_4) \frac{\partial F}{\partial \rho} = E \chi_2. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $V(\rho)$ — кулоновское отталкивание (см. (3)), \hat{T}_0 и \hat{T}_1 — операторы кинетической энергии для азимутальных моментов соответственно 0 и 1:

$$\begin{aligned} \hat{T}_0 &= -\frac{1}{m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right), \\ \hat{T}_1 &= -\frac{1}{m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \right) \end{aligned} \quad (13)$$

(приведенная масса равна $m/2$). Уравнение для χ_3 отличается от (12) заменой знака, $A \rightarrow -A$, а уравнение для χ_4 совпадает с (11). В системе (11), (12) уже проведена эрмитизация (последнее слагаемое в левых частях). Из полученных уравнений следует, что

$$\begin{aligned} (\hat{T}_0 + V(\rho)) (\chi_2 + \chi_3) &= E (\chi_2 + \chi_3), \\ (\hat{T}_1 + V(\rho)) (\chi_1 - \chi_4) &= E (\chi_1 - \chi_4). \end{aligned} \quad (14)$$

Уравнения (14) не содержат вкладов СОВ, описывают состояния типа рассеяния двух отталкивающихся частиц, т. е. не могут дать искомого локализованного решения. Поэтому ищем решение задачи, в котором выполняются условия $\chi_1 = \chi_4, \chi_2 = -\chi_3$, и приходим окончательно к системе двух уравнений:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \right) \chi_1 + V(\rho) \chi_1 + \\
& + \frac{2A}{\varepsilon} \left[\left(\frac{e}{D^2} + \frac{eD}{(D^2 + \rho^2)^{3/2}} \right) \frac{\partial}{\partial \rho} - \right. \\
& \quad \left. - \frac{3eD\rho}{2(D^2 + \rho^2)^{5/2}} \right] \chi_2 = E\chi_1, \\
& -\frac{1}{m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \chi_2 + V(\rho) \chi_2 - \\
& - \frac{2A}{\varepsilon} \left[\left(\frac{e}{D^2} + \frac{eD}{(D^2 + \rho^2)^{3/2}} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \right) - \right. \\
& \quad \left. - \frac{3eD\rho}{2(D^2 + \rho^2)^{5/2}} \right] \chi_1 = E\chi_2.
\end{aligned} \tag{15}$$

Здесь важно отметить, что равные друг другу функции χ_1 и χ_4 соответствуют симметричным по спинам состояниям пары частиц u_1v_1 и u_2v_2 (см. (5)), а в полной волновой функции ψ величина χ_1 множится на $e^{-i\varphi}$, а χ_4 — на $e^{i\varphi}$ (уравнение (10)). Таким образом, при перестановке частиц φ переходит в $\varphi + \pi$, так что полная функция оказывается антисимметричной по перестановке. В случае же компонент ψ_2, ψ_3 зависимость от угла φ отсутствует, а условие $\chi_2 = -\chi_3$ снова обеспечивает антисимметрию полной волновой функции, поскольку $\psi_2 = u_1v_2$, $\psi_3 = u_2v_1$. Итак, решения уравнений (15) удовлетворяют принципу Паули и соответствуют полному спину системы, равному единице. Физически это вполне понятно: спин-орбитальный вклад в энергию от обоих электронов одинаков — именно такая ситуация может привести к образованию связанного состояния, причем антисимметрия полной функции по координатам частиц обеспечивает минимизацию кулоновского вклада в энергию системы.

Искомые решения χ_1, χ_2 должны быть регулярны при $\rho = 0$ и убывать на бесконечности достаточно быстро для выполнения условия нормировки

$$\begin{aligned}
& \int \sum_{i=1}^4 |\psi_i|^2 \rho d\rho d\varphi = \\
& = 4\pi \int (|\chi_1|^2 + |\chi_2|^2) \rho d\rho = 1. \tag{16}
\end{aligned}$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА

В асимптотической области $\rho \gg D$ кулоновский потенциал стремится к нулю, а величина F в спин-орбитальном вкладе — к постоянной $e/\varepsilon D^2$ и уравнения решаются точно:

$$\chi_1 = BK_1(q\rho) + \text{с.с.}, \quad \chi_2 = -iBK_0(q\rho) + \text{с.с.} \tag{17}$$

где B — константа, определяемая условием нормировки, K_0, K_1 — функции Макдональда,

$$q = \sqrt{k^2 - (m\alpha_0)^2} + im\alpha_0, \quad k^2 \equiv -mE. \tag{18}$$

Таким образом, решение экспоненциально затухает на бесконечности, если $\text{Re } q > 0$, т.е. $E < -m\alpha_0^2$ в полном соответствии с требованием, чтобы уровень связанного состояния лежал ниже суммарной минимальной энергии двух невзаимодействующих электронов. Как видно из соотношения (18), аргумент функций Макдональда является комплексной величиной, поэтому функции χ_1, χ_2 даже основного состояния на бесконечности экспоненциально затухают с осцилляциями, что является особенностью задачи с многокомпонентной волновой функцией.

Численные расчеты проводились с использованием процедуры «NDEigensystem» системы «Wolfram Mathematica». В системе (15) на функцию χ_1 действует четный по ρ оператор, а на функцию χ_2 — нечетный. Здесь мы учитываем тот факт, что для численных расчетов в кулоновском потенциале расходящееся в нуле слагаемое $1/\rho$ заменяется на $1/\sqrt{\rho^2 + \delta^2}$, где выбирается обрезка: $\delta = D/10$. Таким образом, кулоновский вклад тоже является четной функцией ρ . Отсюда следует, что для минимального полного момента пары функция χ_1 должна быть нечетной, а χ_2 — четной функцией ρ . Поэтому при замене ρ на $-\rho$ система (15) не меняется, следовательно, область изменения переменной ρ можно продлить до минус бесконечности. Тогда при решении задачи достаточно применить нулевые граничные условия на $\pm\infty$, а из получившихся решений выбрать решения с нужной четностью.

Разумеется, для реализации обсуждаемого эффекта нужны материалы с сильным СОВ и с сильной зависимостью этого взаимодействия от электрического поля. Из данных работ [3, 9, 10] можно вычислить, что в квантовых ямах Bi_2Se_3 постоянная A в соотношении $\alpha = AF_z$ равна $2 \cdot 10^2 \text{ см}^2(\text{В} \cdot \text{с})^{-1}$. При $\varepsilon = 10$, $m = 0.1m_e$, $D = 30 \text{ \AA}$ получим $\alpha_0 = 2.5 \cdot 10^7 \text{ см/с}$. Расчет с указанными значениями параметров дает для энергии связи биэлектрона $\Delta = |E_0 + m\alpha_0^2|$ величину $\Delta \simeq 1.7 \text{ мэВ}$, размер локализованного состояния получается порядка 60 \AA .

4. КОНЕЧНЫЙ ИМПУЛЬС БИЭЛЕКТРОНА

При учете движения электронной пары как целого в задаче появляется сохраняющийся вектор — суммарный импульс биэлектрона. Цилиндрическая симметрия более не имеет места, и следует

воспользоваться декартовыми координатами. Чтобы использовать диагональность матрицы σ_z для упрощения записи уравнений, удобно считать, что квантовая яма расположена в плоскости xz , суммарный импульс пары направлен вдоль оси x , а нормаль к структуре есть ось y . Система уравнений для компонент биспинорной волновой функции приобретает вид

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 - APF) \psi_1 - A \{ \hat{p}_z F (\psi_2 - \psi_3) \} &= E \psi_1, \\ \hat{H}_0 \psi_2 - 2A \{ \hat{p}_x F \psi_2 \} - A \{ \hat{p}_z F (\psi_1 - \psi_4) \} &= E \psi_2, \\ \hat{H}_0 \psi_3 + 2A \{ \hat{p}_x F \psi_3 \} + A \{ \hat{p}_z F (\psi_1 - \psi_4) \} &= E \psi_3, \\ (\hat{H}_0 + APF) \psi_4 + A \{ \hat{p}_z F (\psi_2 - \psi_3) \} &= E \psi_4, \end{aligned} \quad (19)$$

где теперь в \hat{H}_0 включена кинетическая энергия центра масс пары $P^2/4m$. Как видим, наличие спин-орбитальной связи не позволяет полностью разделить движение центра масс и внутреннее движение в паре, поэтому энергия связи биэлектрона зависит от его суммарного импульса. Этот результат не противоречит принципу относительности, поскольку пара движется относительно системы отсчета, в которой существует электрическое поле, дающее эффективное магнитное поле в системе, связанной с парой. Численное решение задачи на собственные значения проводилось также с использованием процедуры «NDEigensystem». Применялись нулевые граничные условия на $\pm\infty$. Зависимости энергии связи от суммарного импульса приведены на рис. 2 в отсутствие и в присутствии приложенного затворного напряжения.

Связанное состояние исчезает при определенном суммарном импульсе пары.

5. КВАЗИОДНОМЕРНАЯ СТРУКТУРА

В случае квантовой проволоки решение задачи о связанной электронной паре становится особенно простым. Выберем направление проволоки в качестве оси x , а направление нормали к металлическому электроду — осью y . Тогда система четырех уравнений для компонент биспинора полностью «расцепляется»:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 - APF(x)) \psi_1 &= E \psi_1, \\ \hat{H}_0 \psi_2 - 2A \{ \hat{p}_x F(x) \psi_2 \} &= E \psi_2, \\ \hat{H}_0 \psi_3 + 2A \{ \hat{p}_x F(x) \psi_3 \} &= E \psi_3, \\ (\hat{H}_0 + APF(x)) \psi_4 &= E \psi_4. \end{aligned} \quad (20)$$

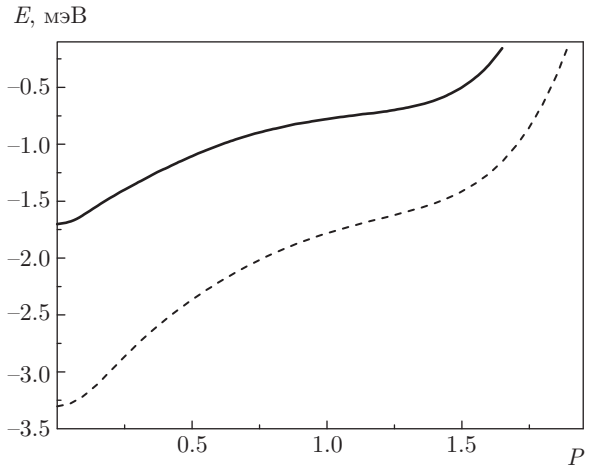


Рис. 2. Зависимости энергии связи биэлектрона от суммарного импульса в единицах \hbar/D при приложенных затворных напряжениях: $f = 0$ (сплошная линия) и $f = 0.1$ (штриховая). Поле f измеряется в единицах $e/\varepsilon D^2 = 1.6 \cdot 10^5$ В/см

В уравнениях для ψ_1 и ψ_4 спин-орбитальный вклад просто добавляется (с разными знаками) к кулоновскому отталкиванию в операторе \hat{H}_0 . Следовательно, по крайней мере одно из этих уравнений заведомо не имеет локализованных решений, поскольку полный потенциал соответствует отталкиванию. Ищем решение для биэлектрона в виде биспинора $(0, \psi_2, \psi_3, 0)$. Введем функции χ_2 и χ_3 по формулам

$$\begin{aligned} \psi_2 &= \exp \left(i \int_0^x F(x') dx' \right) \chi_2(x), \\ \psi_3 &= - \exp \left(-i \int_0^x F(x') dx' \right) \chi_3(x) \end{aligned}$$

и получим для них идентичные уравнения:

$$-\frac{1}{m} \chi_{2,3}'' + [V(x) - mA^2 F^2(x)] \chi_{2,3} = E \chi_{2,3}. \quad (21)$$

Как видно из (21), СОВ независимо от знака константы A дает притяжение между электронами, так что существование связанного состояния становится лишь вопросом численного соотношения между кулоновским и спин-орбитальным вкладами в полный потенциал в уравнении (21). Энергия связи одномерного биэлектрона не зависит от его суммарного импульса, а зависимость от P входит лишь тривиальной добавкой $P^2/4m$ в полную энергию системы. Интеграл $\int_0^x F(x') dx'$ в показателях экспонент является нечетной функцией относительной координаты x , которая меняет знак при перестановке

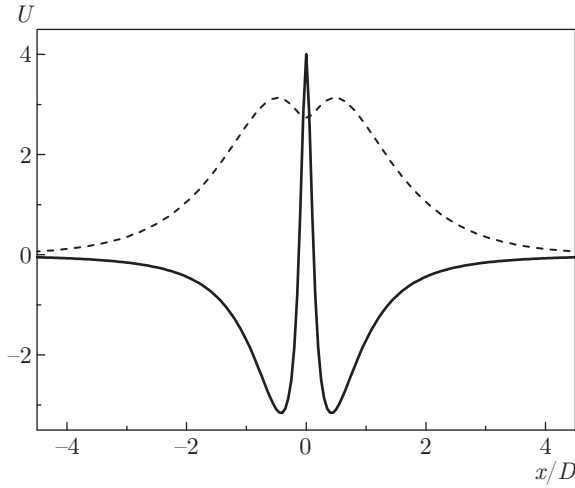


Рис. 3. Графики эффективного потенциала $U = V - mA^2F^2$ в квантовой проволоке в единицах \hbar^2/mD^2 (сплошная линия) и волновой функции основного состояния (штриховая)

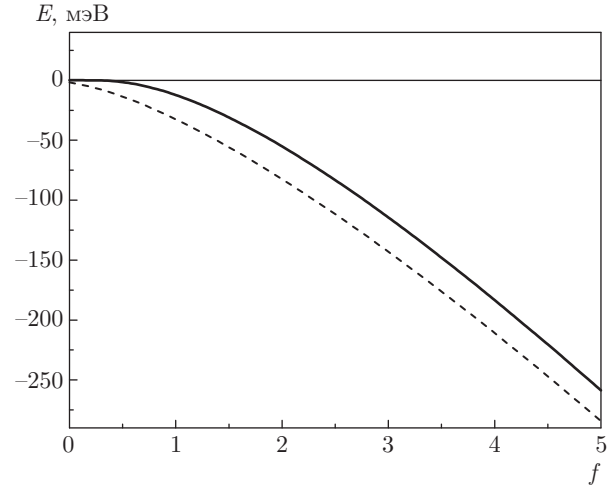


Рис. 4. Зависимость энергии связи биэлектрона от приложенного затворного напряжения. Сплошная линия — квантовая проволока, штриховая — двумерная система. Поле f измеряется в единицах $e/\epsilon D^2 = 1.6 \cdot 10^5$ В/см

частиц. Поэтому для четного решения χ (основной уровень биэлектрона) ψ_2 переходит в $-\psi_3$ при перестановке, что и необходимо (ср. с рассмотренным выше случаем для двумерной ситуации). Поскольку в обсуждаемом решении две компоненты биспинора, ψ_1 и ψ_4 , равны нулю, образовавшаяся электронная пара обладает нулевым полным спином (четное χ !). Наложение на структуру затворного напряжения (gate voltage) эквивалентно добавлению константы f в выражении для поля $F(x)$. Это приводит к появлению в эффективном потенциале общего отрицательного сдвига энергии, пропорционального f^2 , и линейного по f дополнительного притягивающего потенциала при $f > 0$.

На рис. 3 приведен график эффективного потенциала в уравнении (21) для $f = 3$, что при тех же значениях параметров соответствует полю $4.8 \cdot 10^5$ В/см, и численно найденная волновая функция основного состояния. Заметим, что при $f = 0$ отрицательного уровня нет. Хотя потенциальная яма $U(x)$ одномерна и симметрична, наличие барьера в центре исключает его существование, так как интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx$ оказывается положительным. Зависимость энергии связи пары от f приведена на рис. 4.

Все изложенное выше основано на гамильтониане (2), в котором удержан лишь вклад взаимодействия Бычкова–Рашба (так называемый Rashba-term), связанный только с нормальной компонентой электрического поля F_z . Оценим теперь роль тангенциального поля \mathbf{F}_τ . Поле $\mathbf{F}_\tau(1)$, действующее

на первый электрон, равно $-\mathbf{F}_\tau(2)$ и дается выражением

$$\mathbf{F}_\tau(1) = \frac{\rho}{\rho} f(\rho) = \frac{\rho}{\rho} \frac{e}{\epsilon} \left[\frac{1}{\rho^2} - \frac{\rho}{(\rho^2 + D^2)^{3/2}} \right] \quad (22)$$

(напомним, что $\rho = \rho_1 - \rho_2$). Часть СОВ, обусловленная полем \mathbf{F}_τ , содержит, конечно, вклад заряда изображения (image charge), но в принципе существует и без металлического электрода, и вообще асимметрия структуры в направлении нормали не обязательна. По существу это полный аналог СОВ в атомах. Действительно, выражение $\mathbf{F}_\tau \cdot [\hat{\mathbf{p}} \times \boldsymbol{\sigma}]$ вследствие отсутствия у $\hat{\mathbf{p}}$ и \mathbf{F}_τ z -компонент можно записать в виде

$$\frac{f(\rho)}{\rho} [\rho \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar f(\rho)}{\rho} \hat{l}_z \sigma_z,$$

где $\hat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ — оператор z -проекции орбитального момента. Такая запись вполне аналогична оператору СОВ в атомах:

$$V_{SO} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2\rho} \frac{dU(\rho)}{d\rho} \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (23)$$

где $U(\rho)$ — потенциальная энергия электрона; в нашем случае $dU/d\rho = ef(\rho)$. При тех же значениях $m = 0.1m_e$, $\epsilon = 10$, считая радиус связанного состояния порядка D , получим оценку $|V_{SO}| \sim 10^{-5}$ мэВ, т. е. величину, гораздо меньшую энергии связи Δ биэлектрона и глубины $m\alpha^2$ эффективной потенциальной ямы. Таким образом, влияние тангенциального поля на формирование биэлектрона пренебрежимо мало.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, в работе показано, что силы электростатического изображения в структуре типа МДП с достаточно тонким диэлектриком могут привести к большому эффективному притяжению между электронами. В результате становится возможным образование связанного состояния пары электронов. Спаривание в двумерной ситуации происходит в триплетном состоянии, а в случае квантовой проволоки основному состоянию отвечает синглетная пара. Энергия связи пары возрастает при приложении к структуре затворного напряжения нужной полярности.

Возможным экспериментальным проявлением образования биэлектронов могло бы стать измерение проводимости квантовой проволоки. Кондуктанс G квазиодномерной системы как функция концентрации n носителей описывается известной ступенчатой функцией. Это соответствует одиночным электронам в качестве носителей тока. Возникновение пар (бозонов с зарядом $2e$) приведет к исчезновению ступеней и к плавной зависимости $G(n)$.

Авторы благодарят В. А. Волкова, И. Ф. Гинзбурга и Э. М. Рашба за полезные советы, В. М. Ковалева и М. В. Энтина за обсуждение работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00565) и программы РАН (проект № 0306-2018-0007).

ЛИТЕРАТУРА

1. I. R. Mc Laughlan, E. M. Lielvelyn-Samuel, and S. Grampin, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 6841 (2004).
2. N. Nakazawa, N. Takagi, Maki Rawai, H. Ishida, and R. Arafune, *Phys. Rev. B* **94**, 115412 (2016).
3. Y. Gindikina and V. Sablikov, *Phys. Rev. B* **95**, 045138 (2017).
4. М. М. Махмудиан, А. В. Чаплик, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 590 (2018).
5. S. Zhou, Y. Wang, and Z. Wang, *Phys. Rev. B* **89**, 195119 (2014).
6. X.-J. Han, Y. Liu, Z.-Y. Liu, X. Li, J. Chen, H.-J. Liao, Z.-Y. Xie, B. Normand, and T. Xian, *New J. Phys.* **18**, 103004 (2016).
7. Ж. А. Девизорова, В. А. Волков, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 101 (2013).
8. Ж. А. Девизорова, А. В. Щепетильников, Ю. А. Нефёдов, В. А. Волков, И. В. Кукушкин, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 102 (2014).
9. A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, and R. A. Duine, *Nature Mater.* **14**, 871 (2015).
10. P. D. C. King, R. C. Hatch, M. Bianki et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 096802 (2011).