ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 10, № 2 (2006) с. 81–85

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 10, No. 2 (2006) p. 81–85

РІВНЯННЯ ПАУЛІ З МАСОЮ, ЗАЛЕЖНОЮ ВІД КООРДИНАТ

В. М. Ткачук, С. І. Вакарчук
Кафедра теоретичної фізики,
Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005, Україна
(Отримано 12 травня 2006 р.; в остаточному вигляді — 8 серпня 2006 р.)

Досліджено рух електрона з масою, залежною від координат, у магнетному полі. У тривимірному випадку зі сферично симетричною залежністю маси від координат і магнетним полем певної симетрії щодо інверсії координат, як і для постійної маси, наявна суперсиметрія з двома трьома й чотирма суперзарядами. У двовимірному випадку при русі частинки у площині з перпендикулярним до неї магнетним полем суперсиметрія з двома суперзарядами існує для довільної координатно залежної маси й довільного магнетного поля. В останньому випадку для циліндрично симетричної залежности маси від координат знайдено точний вираз для хвильових функцій основного стану з нульовою енерґією. Знайдено кількість нульових мод електрона з масою залежною від координат у магнетному полі, що узагальнює теорему Аронова–Кашера, отриману раніше для постійної маси.

Ключові слова: рівняння Паулі, координатно залежна маса, нульові моди.

PACS number(s): 03.65.−w, 11.30.Pb

I. ВСТУП

Останнім часом значний інтерес викликають задачі про квантовий рух частинок, ефективна маса яких залежить від координат. Запропонована для опису домішок у кристалах [1] теорія ефективної маси стала важливим інґредієнтом при описі електронних властивостей, наприклад, напівпровідників [2] і квантових ям [3, 4]. Цей формалізм інтенсивно використовували в теорії ядер [5], квантових рідин [6], металічних кластерах [7].

Дослідження квантовомеханічних систем із масою, залежною від координат, порушує важливі коцептуальні проблеми, такі, як упорядкування оператора імпульсу залежної від координат маси в кінетичній енерґії, граничні умови на межі двох середовищ із різними масами, Ґалілеєва інваріянтність теорії [8,9], перехід від релятивістської квантової теорії до класичної [10]. Ширший огляд стосовно квантовомеханічного руху частинок із масою, залежною від координат, можна знайти в [11–13].

З іншого боку, важливою й цікавою задачею квантової механіки є задача про рух електрона в магнетному полі. Точні енерґетичні рівні та хвильові функції при русі електрона в однорідному магнетному полі вперше знайшов Ландау. Пізніше Аронов і Кашер дослідили основний стан електрона при двовимірному русі в довільному неоднорідному магнетному полі, яке перпендикулярне до площини руху. Була відкрита теорема, яка стверджує, що кількість станів з нульовою енерґією пропорційна до потоку магнетного поля через площину руху [14].

Зауважимо також, що задача про рух електрона в магнетному полі виявляє суперсиметричні властивості. Показано, що суперсиметрія з двома суперзарядами реалізується у двовимірному випадку з магнетним полем $B_x = B_y = 0$, $B_z = B(x, y)$ і тривимірному випадку, коли магнетне поле є парним або непарним щодо інверсії координат $\mathbf{B}(-\mathbf{r}) = \pm\mathbf{B}(\mathbf{r})$ [15–17]. Суперсиметрія наявна також при русі електрона по довільній поверхні, ортогональній до силових ліній магнетного поля [18]. У наших працях [19, 20], а також роботах Нікітіна [21, 22] знайдено нові тривимірні магнетні поля, при русі електрона в яких реалізується суперсиметрія з двома, трьома й чотирма суперзарядами. Двовимірну суперсиметричну квантову механіку з чотирма суперзарядами розглянуто в роботі [23].

Зауважимо, що задача про двовимірний рух електрона в магнетному полі може мати практичне значення для вивчення квантових станів електрона в тонкій напівпровідниковій плівці чи шаруватих кристалах. Якщо матеріял неоднорідно леґований домішками, то ефективно рух електрона можна описати рівнянням Паулі з масою, залежною від координат. З цього погляду цікавою є задача про основний стан гамільтоніяна Паулі з координатно залежною масою. Ця задача і є предметом нашої статті.

II. ГАМІЛЬТОНІЯН ПАУЛІ З МАСОЮ, ЗАЛЕЖНОЮ ВІД КООРДИНАТ

Нагадаємо спочатку результати стосовно суперсиметрії гамільтоніяна Паулі з постійною масою m_0

$$H = \frac{1}{2m_0}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - g\frac{e\hbar}{4m_0c}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}, \qquad (2.1)$$

де σ_α — матриці Паулі, $\mathbf{A}$ — векторний потенціял, $\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{A}$, g — фактор для електрона незначно відрізняється від 2. Тому в цій статті будемо вважати, що $g = 2$ і тоді гамільтоніян Паулі можна записати так:

$$H = Q_0^2, \tag{2.2}$$

де

$$Q_0 = \frac{1}{\sqrt{2m_0}} \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right). \tag{2.3}$$

Зауважимо, що саме випадок $g = 2$ приводить до можливої реалізації суперсиметрії при русі електрона в магнетному полі.

Розгляньмо масу, залежну від модуля радіус-вектора $r = |\mathbf{r}|$,

$$m(r) = \frac{m_0}{f^2(r)}, \tag{2.4}$$

де $f(r)$ називається функцією деформації. При цьому виникає добре відома проблема впорядкування маси й оператора імпульсу в кінетичній енерґії. Ми розглянемо один зі способів упорядкування, який зберігає структуру гамільтоніяна (2.2), тобто гамільтоніян залишається квадратом ермітового оператора Q_0

$$\begin{aligned} Q_0 &= \frac{1}{\sqrt{2m_0}} \sqrt{f(r)} \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \sqrt{f(r)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m_0}} \boldsymbol{\sigma\pi}, \end{aligned} \tag{2.5}$$

де ми ввели позначення

$$\boldsymbol{\pi} = \sqrt{f(r)} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \sqrt{f(r)}. \tag{2.6}$$

Оператор інверсії I_α осі x_α комутує з $f(r)$ і виконує роль оператора парности Віттена. Тому суперсиметрія з двома, трьома й чотирма суперзарядами, виявлена у випадку постійної маси для відповідних полів [19–22], зберігається і для маси, залежної від r. Суперзаряди записуються $Q_0, Q_\alpha = iI_\alpha Q_0$, $\alpha = 1, 2, 3$ і задовольняють алґебру суперсиметрії

$$\{Q_i, Q_j\} = \delta_{i,j} H, \quad [Q_i, H] = 0, \quad i, j = 0, 1, \ldots, n, \tag{2.7}$$

де $n = 1$ відповідає двом суперзарядам, $n = 2$ — трьом і $n = 3$ — чотирьом.

У явному вигляді гамільтоніян Паулі (2.2) з Q_0, заданим в (2.5), запишемо

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m_0} \boldsymbol{\pi}^{\mathbf{2}} - \frac{e\hbar}{2m_0 c} f^2 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} \\ &+ \frac{\hbar}{m_0} f f' \left(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{L} - \frac{e}{c} \boldsymbol{\sigma} [\mathbf{rA}] \right), \end{aligned} \tag{2.8}$$

де $\mathbf{L}$ оператор моменту кількости руху, $f' = df/dr^2$. Наявність маси, залежної від координат, приводить до нових доданків у гамільтоніяні. Навіть за відсутности магнетного поля існує доданок, який можна трактувати як спін-орбітальну взаємодію (доданок пропорційний $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{L}$ в (2.8)). Аналогічний доданок уперше отриманий у [10] в межах Діраківської теорії електрона з деформованою алґеброю Гайзенберґа.

III. СУПЕРСИМЕТРІЯ ГАМІЛЬТОНІЯНА ПАУЛІ З МАСОЮ, ЗАЛЕЖНОЮ ВІД КООРДИНАТ. 2D ВИПАДОК

Розгляньмо рух електрона в площині $x - y$ в аксіяльно симетричному магнетному полі, перпендикулярному до площини з векторним потенціялом

$$A_x = -yA(\rho), \quad A_y = xA(\rho), \quad \rho = \sqrt{x^2 + y^2}. \tag{3.9}$$

У двовимірному випадку

$$Q_0 = \frac{1}{\sqrt{2m_0}} (\sigma_x \pi_x + \sigma_y \pi_y). \tag{3.10}$$

Оператор парности Віттена, який антикомутує з Q_0, у випадку змінної маси, як і у випадку постійної, є таким: $T = \sigma_z$. У результаті ми приходимо до суперсиметрії з двома суперзарядами Q_0 і $Q_1 = i\sigma_z Q_0$, які задовольняють алґебру суперсиметрії (2.7) з двома суперзарядами. Як наслідок усі ненульові енерґетичні є двократно виродженими.

У матричному зображенні маємо

$$Q_0 = \frac{1}{\sqrt{2m_0}} \begin{pmatrix} 0 & \pi_- \\ \pi_+ & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.11}$$

де $\pi_\pm = \pi_x \pm i\pi_y$. Відповідно гамільтоніян запишемо

$$H = \frac{1}{2m_0} \begin{pmatrix} \pi_- \pi_+ & 0 \\ 0 & \pi_+ \pi_- \end{pmatrix}. \tag{3.12}$$

Гамільтоніян є діягональним з факторизованими операторами. Саме факторизація дає змогу дослідити основний стан з нульовою енерґією.

IV. НУЛЬОВІ МОДИ ЕЛЕКТРОНА В МАГНЕТНОМУ ПОЛІ. 2D ВИПАДОК

На початку зауважимо, що $[\sigma_z, H] = 0$ і σ_z є інтеґралом руху. Тому власний стан гамільтоніяна є одночасно власним станом оператора σ_z чи спіну електрона $s_z = \hbar\sigma_z/2$. Для власного значення спіну електрона $-\hbar/2$ хвильова функція має вигляд

$$\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_- \end{pmatrix}, \tag{4.13}$$

де ψ_- задовольняє рівняння $\pi_+\pi_-\psi_- = 0$, звідки випливає рівняння першого порядку $\pi_-\psi_- = 0$, яке у явному вигляді запишемо так:

$$\begin{aligned} &\sqrt{f(\rho)} \left(-i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} + q(A_x + iA_y) \right) \\ &\times \sqrt{f(\rho)} \psi_- = 0, \end{aligned} \tag{4.14}$$

де $q = |e|/\hbar c$.

У полярних координат $x = \rho\cos\phi, \quad y = \rho\sin\phi$ це рівняння є таким:

$$\left(\frac{\partial}{\partial\rho} - i\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi} + q\rho A(\rho)\right)\sqrt{f(\rho)}\psi_- = 0. \tag{4.15}$$

Шуканий розв'язок запишемо

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{f(\rho)}}e^{im\phi}R(\rho), \tag{4.16}$$

де $\hbar m$ — власне значення z-компоненти оператора моменту кількости руху $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$. Радіяльна частина хвильової функції задовольняє рівняння

$$\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m}{\rho}\right)R = -q\rho A(\rho)R \tag{4.17}$$

з розв'язком

$$R = \rho^{-m}\exp\left(-q\int_0^\rho \rho A(\rho)d\rho\right). \tag{4.18}$$

З умови несинґулярности розв'язку при $\rho \to 0$ момент кількости руху має бути від'ємним $-m = 0, 1, 2, \dots$. Вираз в експоненті запишемо через потік магнетного поля. Для цього зауважимо, що магнетне поле

$$B_z = B(\rho) = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^2 A(\rho). \tag{4.19}$$

Звідки знаходимо

$$A(\rho) = \frac{1}{2\pi\rho^2}\Phi(\rho), \tag{4.20}$$

де $\Phi(\rho) = 2\pi\int_0^\rho \rho B(\rho)d\rho$ — потік магнетного поля через круг радіусом ρ. Тоді хвильову функцію основного стану запишемо так:

$$\psi_- = C\frac{1}{\sqrt{f(\rho)}}e^{im\phi}\rho^{-m}e^{-I(\rho)}, \tag{4.21}$$

де ми ввели позначення

$$I(\rho) = \frac{1}{\Phi_0}\int_0^\rho \frac{\Phi(\rho)}{\rho}d\rho, \tag{4.22}$$

$\Phi_0 = 2\pi/q = 2\pi\hbar c/|e|$ — квант магнетного потоку, C — константа нормування.

Для того, щоб бути фізично прийнятливим, розв'язок (4.21), який відповідає зв'язаному стану, повинен задовольняти такі умови:

1. Хвильова функція має бути квадратично інтеґровна, що є звичайною вимогою для зв'язаних станів у квантовій механіці. У цьому випадку

$$\int dx\,dy\,|\psi_-|^2 = 1. \tag{4.23}$$

2. Оператори π_i повинні задовольняти умову ермітовости. У двовимірному випадку хвильові функції, для яких виконується ця умова, у границі $x, y \to \infty$ мусять мати властивість

$$\rho f|\psi_-|^2 \to 0. \tag{4.24}$$

В одновимірному випадку ця умова була отримана в [12] (формула 2.27).

Доведення властивости (4.24) для двовимірного випадку в основному повторює доведення, наведене в [12] для одновимірного простору. Умову ермітовости оператора $\sqrt{f}\mathbf{p}\sqrt{f}$ запишемо

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,\psi^*(x,y)\sqrt{f}\mathbf{p}\sqrt{f}\phi(x,y)\\ &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,\phi^*(x,y)\sqrt{f}\mathbf{p}\sqrt{f}\psi(x,y)\right]^*.\end{aligned} \tag{4.25}$$

Використовуючи

$$\psi^*\sqrt{f}\mathbf{p}\sqrt{f}\phi = \mathbf{p}\psi^* f\phi - \sqrt{f}\phi\mathbf{p}\sqrt{f}\psi^*,$$

де $\mathbf{p} = i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ і $\boldsymbol{\nabla}$ — двовимірний оператор, ми перепишемо ліву частину рівняння (4.25) так:

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,\psi^*(x,y)\sqrt{f}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}\right)\sqrt{f}\phi(x,y)\\ &= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\,\boldsymbol{\nabla}\psi^*(x,y)f(x,y)\phi(x,y)\\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,\phi(x,y)\sqrt{f}\left(i\hbar\boldsymbol{\nabla}\right)\sqrt{f}\psi^*(x,y).\end{aligned} \tag{4.26}$$

Застосувавши до першого доданка в правій частині (4.26) інтеґральну теорему

$$\int dV\,\boldsymbol{\nabla}F = \oint d\mathbf{S}\,F$$

для двовимірного випадку, знаходимо, що цей доданок дорівнює нулеві при умові $\rho f\psi^*\phi \to 0$, $\rho \to \infty$. Це забезпечує ермітовість оператора $\sqrt{f}\mathbf{p}\sqrt{f}$ а значить і $\boldsymbol{\pi}$. Для зв'язаних станів з нульовою енерґією при $\psi = \phi = \psi_-$ ця умова зводиться до (4.24).

Розгляньмо границю $\rho \to \infty$. Нехай повний потік магнетного поля через площину $x-y$ дорівнює Φ, тобто

$$\lim_{\rho\to\infty}\Phi(\rho) = \Phi. \tag{4.27}$$

Тоді в границі $\rho \to \infty$

$$I(\rho) = \frac{\Phi}{\Phi_0}\ln\rho \tag{4.28}$$

і для асимптотики квадрата модуля хвильової функції при $\rho \to \infty$ маємо

$$|\psi_-|^2 = \frac{1}{f(\rho)}\rho^{-2m-2\Phi/\Phi_0}. \tag{4.29}$$

Відповідно в цій границі

$$\rho f|\psi_-|^2 = \rho^{1-2m-2\Phi/\Phi_0}. \tag{4.30}$$

Отримані результати дають змогу знайти кількість зв'язаних станів з нульовою енерґією. Ця кількість залежить від асиптотичної поведінки $f(\rho)$ при великих ρ. Нехай

$$f(\rho) = f_0\rho^\kappa \tag{4.31}$$

при $\rho \to \infty$, f_0 — константа.

Із умови збіжности інтеґрала (4.23) та з урахуванням, що $-m \geq 0$, знаходимо

$$0 \leq -m < \frac{\Phi}{\Phi_0} + \frac{\kappa}{2} - 1. \tag{4.32}$$

З другої умови (4.24) з урахуванням (4.30) маємо

$$0 \leq -m < \frac{\Phi}{\Phi_0} - \frac{1}{2}. \tag{4.33}$$

Кількість зв'язаних станів $N_0 = 1 + (-m)_{\max}$, де $(-m)_{\max}$ — максимальне значення, яке може приймати $-m$.

При $\kappa < 1$ визначальною є перша умова (4.32), і для кількости зв'язаних станів з нульовою енерґією знаходимо

$$N_0 = \begin{cases} \Phi/\Phi_0 + \kappa/2 - 1, & \text{коли } \Phi/\Phi_0 + \kappa/2 \text{ — ціле,} \\ [\Phi/\Phi_0 + \kappa/2]\,, & \text{коли } \Phi/\Phi_0 + \kappa/2 \text{ — не ціле,} \end{cases}$$

де $[\ldots]$ означає цілу частину числа. При $\kappa = 0$, що відповідає випадку постійної маси в асимптотиці $\rho \to \infty$, цей результат відтворює теорему Аронова–Кашера.

При $\kappa > 1$ друга умова (4.33) є сильнішою за першу і в результаті

$$N_0 = \begin{cases} \Phi/\Phi_0 - 1/2, & \text{коли } \Phi/\Phi_0 - 1/2 \text{ — ціле,} \\ [\Phi/\Phi_0 + 1/2]\,, & \text{коли } \Phi/\Phi_0 - 1/2 \text{ — не ціле.} \end{cases}$$

V. ВИСНОВКИ

Ми вивчаємо рух електрона з масою, залежною від координат у магнетному полі, який описується гамільтоніяном Паулі. При цьому ми вважаємо, що гамільтоніян Паулі зі змінною масою має ту саму структуру $H = Q_0^2$, як і для постійної маси. Наявність маси, залежної від координат, приводить до нових доданків у гамільтоніяні. Навіть за відсутности магнетного поля існує доданок, який можна трактувати як спін-орбітальну взаємодію (доданок пропорційний $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{L}$ у (2.8)).

У тривимірному випадку з масою, залежною від $|\mathbf{r}|$, і магнетним полем певної симетрії щодо інверсії координат, як і у випадку постійної маси, існує суперсиметрія з двома, трьома й чотирма суперзарядами. У двовимірному випадку при русі частинки у площині $x - y$ з перпендикулярним до неї магнетним полем суперсиметрія з двома суперзарядами існує для довільної координатно залежної маси й довільного магнетного поля. В останньому випадку для циліндрично симетричної залежности маси від координат знайдено точний вираз для хвильових функцій основного стану з нульовою енерґією. Знайдено кількість нульових мод електрона з масою, залежною від координат у магнетному полі, що узагальнює теорему Аронова–Кашера, отриману раніше для постійної маси. Показано, що кількість нульових мод визначається як величиною потоку магнетного поля через площину руху електрона, так і асимптотичною поведінкою маси на нескінченості.

[1] G. H. Wannier, Phys. Rev. **52**, 191 (1937); J. C. Slater, Phys. Rev. **76**, 1592 (1949); J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
[2] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Editions de Physique, Les Ulis, 1988).
[3] L. Serra, E. Lipparini, Europhys. Lett. **40**, 667 (1997).
[4] М. В. Ткач, Я. М. Березовський, Журн. фіз. дослідж. **7**, 188 (2003).
[5] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem* (Springer, New York, 1980).
[6] F. Arias de Saavedra, J. Boronat, A. Pols, A. Fabrochini, Phys. Rev. B **50**, 4248 (1994).
[7] A. Puente, L. Serra, M. Casas, Z. Phys. D **31**, 283 (1995).
[8] J. M. Levy-Leblond, Phys. Rev. A **52**, 1845 (1995).
[9] F. S. Cavalcante, F. R. N. Costa, F. J. Rebeiro, C. A. S. de Almeida, V. N. Freire, Phys. Rev. B **55**, 1326 (1997).
[10] I. O. Vakarchuk, J. Phys. A **38**, 7567 (2005).
[11] C. Quesne, V. M. Tkachuk, J. Phys. A **37**, 4267 (2004).
[12] D. Bagchi, A. Banerjee, C. Quesne, V. M. Tkachuk, J. Phys. A, **38**, 2929 (2005).
[13] I. O. Vakarchuk, J. Phys. A **38**, 4727 (2005).
[14] Y. Aharonov, A. Casher, Phys. Rev. A **19**, 2461 (1978).
[15] Л. Э. Генденштейн, И. В. Криве, Усп. физ. наук **146**, 553 (1985).
[16] Л. Э. Генденштейн, Яд. физ. **41**, 261 (1985).
[17] Л. Э. Генденштейн, Письма журн. эксп. теор. физ. **39**, 234 (1984).
[18] Ю. А. Ситенко, Яд. физ. **51**, 1416 (1990).
[19] В. М. Ткачук, С. І. Вакарчук, Журн. фіз. дослідж. **1**, 39 (1996).
[20] V. M. Tkachuk, S. I. Vakarchuk. Phys. Lett. A **228**, 141 (1997).
[21] A. Nikitin, 10 International Conf. "Problems of quantum field theory", JINR E2–96–369 (1996).
[22] J Niederle, A. Nikitin, J. Phys. A **30**, 999 (1997).
[23] V. Berezovoj, A. Pashnev, Class. Quantum Grav. **13**, 1699 (1996); hep-th/950694.

РІВНЯННЯ ПАУЛІ З МАСОЮ, ЗАЛЕЖНОЮ ВІД КООРДИНАТ

PAULI EQUATION WITH POSITION-DEPENDENT MASS

V. M Tkachuk, S. I. Vakarchuk
Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv,
12, Drahomanov St., Lviv, UA–79005, Ukraine
tkachuk@ktf.franko.lviv.ua

The motion of electron with position-dependent mass is studied. For three dimensional space with a spherically symmetric dependence of mass on coordinates there exists supersymmetry with two, three and four supercharges similarly to constant mass. In the two-dimensional case the supersymmetry with two supercharges exists for an arbitrary dependence of mass on position and an arbitrary magnetic field, which is perpendicular to the plane of electron motion. For the latter case and an axially symmetric dependence of mass on coordinates exact wave functions for zero energy ground state are found. The number of zero modes for an electron with position dependent mass in magnetic field is found as well. This result is the generalization of Aharonov–Casher theorem obtained for constant mass for the case of position-dependent mass.