

自旋-轨道耦合系统的电子涡旋*

周永香¹⁾ 薛迅^{1)2)†}¹⁾ (华东师范大学物理系, 上海 200241)²⁾ (新疆大学物理与技术学院, 乌鲁木齐 830046)

(2022 年 4 月 19 日收到; 2022 年 5 月 29 日收到修改稿)

在轨道角动量守恒的无自旋-轨道耦合系统中存在带轨道角动量量子数的电子涡旋波解, 研究了存在自旋-轨道耦合, 轨道角动量不守恒的系统, 发现携带总角动量量子数的电子旋量波函数也有涡旋波解, 表现为自旋波函数和涡旋波波函数的纠缠波函数. 以中心力场中的电子为例, 构建了自旋-轨道耦合导致的轨道角动量不守恒但总角动量守恒的情况下, 携带固定总角动量量子数的电子沿 z 轴传播的涡旋波旋量波函数结构. 对自旋-涡旋纠缠中相应的电子涡旋波进行了微扰求解, 并结合 Foldy-Wouthuysen 变换, 说明了在相对论情况下, 中心力场中携带固定总角动量量子数的电子沿 z 轴传播时也确实存在四分量旋量的涡旋解, 从而为有自旋-轨道耦合导致的轨道角动量不守恒但总角动量守恒的系统提供了存在涡旋结构的理论支持.

关键词: 相对论电子涡旋波, 中心力场, Foldy-Wouthuysen 变化, 自旋-轨道耦合**PACS:** 03.65.-w, 03.65.Ge, 03.65.Pm**DOI:** 10.7498/aps.71.20220751

1 引言

涡旋现象普遍出现于很多系统中, 比如在经典流体系统、量子流体系统、非线性场系统和光学系统中. 携带轨道量子数 l 的光波构成光学中的涡旋现象. Uchida 和 Tonomura^[1] 首先将涡旋光波的概念推广到了电子涡旋波, 即携带轨道角动量的传播电子态, 涡旋波的普遍特征是其等相面为连续螺旋面. 在以传播方向为轴向的柱坐标系中, 其波函数具有轨道角动量本征态 $e^{il\varphi}$ 形式的相位因子, φ 是关于传播轴的方位角, l 为轨道角动量量子数, 涡旋波波函数具有连续螺旋状的等相位面^[2-6]. 量子化的涡旋可以对应到带非平庸拓扑数的拓扑孤立子解, Nye 和 Berry^[7] 首先观察到这种非平庸的拓扑结构, 他们认为这是波列中类似于晶体缺陷的螺旋式位错.

对电子涡旋态的描述可以借助薛定谔方程、狄拉克方程和克莱因戈登方程的涡旋波解, 这三种方程的涡旋波解分别描述电子涡旋波的非相对论极限、电子涡旋波的相对论旋量结构和电子涡旋波的相对论行为^[1,8-13]. 由于电子涡旋波携带轨道角动量, 表现为具有角动量本征态 $e^{il\varphi}$ 形式的分离变量解, 等相面为螺旋面, 在非相对论薛定谔方程研究框架中, 自由电子和恒定磁场中的电子具有守恒的轨道角动量分量, 均保证了波函数存在角动量本征态 $e^{il\varphi}$ 形式的分离变量解^[14], 涡旋波即为这种具有确定轨道角动量的电子传播波函数. 对自由电子, 从狄拉克哈密顿量来看, 总角动量是守恒的, 但轨道角动量和自旋角动量的 z 分量各自并不守恒, 而在非相对论极限下, 自由电子的哈密顿与轨道角动量的 z 对易, 为了将相对论协变的理论过渡到非相对论极限, Barret^[15] 指出, 正确的做法是借助 Foldy-Wouthuysen(F-W) 变换, 这样才能得到正

* 国家自然科学基金 (批准号: 11775080, 11865016) 和重庆市自然科学基金 (批准号: CSTB2022NSCQ-MSX0351) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xxue@phy.ecnu.edu.cn

确的薛定谔方程作为相对论电子波动方程的非相对论极限,使哈密顿量、电子波函数与轨道角动量具有良好的定义. F-W 变换对狄拉克旋量做么正变换使得狄拉克哈密顿量对角化,在该表象 (F-W 表象) 中,四旋量的上下二旋量满足的方程可以分离,在 F-W 表象中重新定义的轨道角动量 L' 和自旋角动量 S' 分别守恒,从而说明携带轨道角动量的自由电子在相对论系统中仍然有好的轨道角动量的定义. 类似地,匀强磁场中的携带轨道角动量的相对论性电子也具有不守恒的轨道角动量和自旋角动量,但是在非相对论极限下,匀强磁场中的电子所对应的哈密顿与磁场方向轨道角动量分量 L_z 对易,在 2020 年 Zou 等^[16] 也同样利用 F-W 变换,对角化电子的狄拉克哈密顿量,从而分离了上下旋量方程,得到了相对论情况下对应的涡旋解和在匀强磁场中涡旋解所对应的 Guoy 相. Barret^[15] 和 Zou 等^[16] 讨论的相对论体系虽然表面上轨道角动量不守恒,但是可以利用表象变换找到与轨道角动量对易的哈密顿,而且这个么正变换也可以重新定义“新的轨道角动量”,使在相对论系统中同样存在守恒的轨道角动量,电子的传播波函数也存在轨道角动量本征态 $e^{il\varphi}$ 的分离变量因子.

在自由电子和匀强磁场中的电子这两类总角动量守恒的相对论体系中,可以通过 F-W 变换构造分别守恒的轨道角动量和自旋角动量,使得体系的轨道自由度和自旋自由度可以分离,亦即不存在自旋-轨道耦合,但更一般的情形是自旋自由度与轨道自由度存在耦合,这时通过表象变换构建分别守恒的轨道角动量和自旋角动量原则上就是不可能的,在非相对论极限下的哈密顿会出现自旋-轨道耦合项,即使在非相对论极限下系统的轨道角动量也不守恒. 比如中心力场中运动的电子,在非相对论极限下,哈密顿量存在中心力场导致的自旋-轨道耦合项,使得轨道角动量和自旋角动量都不再是守恒量,对于自由电子和匀强磁场中的电子由于轨道角动量守恒导致的电子涡旋解存在的机制就不再成立了. 但总角动量依然保持守恒,具有确定总角动量子数的量子态,其不同自旋态轨道角动量只能相差 \hbar ,确定自旋的态其轨道角动量子数依然是确定的,依然可以具有涡旋态,但自旋-轨道耦合会使不同自旋态对应的涡旋态之间产生纠缠,体系仍然可以具有涡旋波结构,只是不同自旋伴随的涡旋波之间会有纠缠而已,这种情况比轨道角动量守恒体系的涡旋波解结构更复杂,现象更丰富.

本文研究了具有自旋-轨道耦合体系涡旋波解的存在问题,从中心力场中的狄拉克方程出发,经过表象变换之后,找到在中心力场中携带轨道角动量的电子,沿 z 轴传播的涡旋解及对应的等相位螺旋面.

2 中心力场中的电子涡旋

2.1 中心力场中的狄拉克方程

相对论电子波函数 ψ 满足狄拉克方程:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (1)$$

其中哈密顿量

$$H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m + V. \quad (2)$$

ψ 为四分量旋量波函数. 这里 \mathbf{p} 为动量矢量, m 是质量, V 理解为 $V\mathbf{I}_4$ (中心力场乘以 4 阶单位矩阵), $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 为狄拉克矩阵^[17]:

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为泡利矩阵, \mathbf{I} 为 2×2 单位矩阵.

对于中心力场, $V = V(R)$, $R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \sqrt{r^2 + z^2}$, (x, y, z) 为空间笛卡尔坐标, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ 为 (x, y) 坐标平面极坐标 (r, φ) 的矢径, (r, φ, z) 构成空间柱坐标. 从 (2) 式中狄拉克密顿量的形式易得 $[L_z, H] \neq 0$, $[S_z, H] \neq 0$, $[J_z, H] = 0$, 其中 L_z, S_z, J_z 分别为轨道角动量 z 分量, 自旋角动量 z 分量, 总角动量 z 分量. 因此无法直接判断中心力场中的相对论性电子是否存在携带轨道角动量沿 z 轴传播的涡旋解. 对于自由电子和恒定磁场中运动的电子的情形,可以借助 F-W 变换,将狄拉克哈密顿量对角化,同时实现轨道自由度与自旋自由度的分离,得到的非相对论近似为无自旋-轨道耦合的泡利方程,即关于二分量旋量的薛定谔方程. 在中心力场的情形,同样借助 F-W 变换,可以将 (1) 式中的四分量旋量波函数中的上下二分量旋量分开,从而变成关于二分量旋量的薛定谔方程作为相对论狄拉克方程的非相对论近似.

2.2 Foldy-Wouthuysen 变换

对 (2) 式中的哈密顿量做 F-W 变换:

$$H = \beta m + \theta + \varepsilon, \quad (4)$$

其中 $\theta = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$ 称为奇算子, 满足 $\{\theta, \beta\} = 0$, 是导致四分量旋量的上下二分量旋量耦合的算子; ε 为

偶算子, 不会导致上下二分量子旋耦合, 满足 $[\varepsilon, \beta] = 0$, 在 (4) 式中 $\varepsilon = V + \beta m$. F-W 变换即为消除哈密顿量中奇算子的么正变换, 借助自由电子的 F-W 变换形式 e^{iS} , 其中 $S = -(i/2m)\beta\theta$ [17–20], 因为 S 被展开为 $1/m$ 的幂级数, 因而在非相对论极限下是“小的”, 只保留到 $(\text{动能}/m)^3$ 和 $(\text{动能})/m^2$ 项, 故在我们所要求的精度阶数内, 做完变换之后的哈密顿量为

$$\begin{aligned} H' &= e^{iS} H e^{-iS} \\ &= H + i[S, H] + \frac{(i)^2}{2!} [S, [S, H]] + \frac{(i)^3}{3!} [S, [S, [S, H]]] \\ &= \beta m + V(r, z) + \frac{1}{2m} \beta \theta^2 - i \frac{1}{2m} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla V(r, z) \\ &\quad - \frac{\theta^3}{3m^2} + \frac{1}{8m^2} \frac{d^2 V(R)}{dR^2} + \frac{1}{4m^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}. \end{aligned} \quad (5)$$

在 H' 中 $\theta' = -(i/2m)\beta\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla V(r) - \theta^3/3m^2$ 为新的奇算子, 对 H' 再做一次 F-W 变换 $e^{iS'}$, 其中 $S' = -(i/2m)\beta\theta'$, 得到

$$H'' = \beta m + V(R) + \frac{1}{2m} \beta \mathbf{p}^2 + \frac{1}{2m} \xi(R) \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \quad (6)$$

其中 $V(R)$ 包含了达尔文项 $(1/8m^2)(d^2 V(R)/dR^2)$, 一般情况下达尔文项相较势能项可以忽略, 本文忽略了达尔文项的贡献;

$$\xi(R) = \frac{1}{2m} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR}. \quad (7)$$

这里的 $V(R)$ 是不含达尔文项的中心力场势能. 哈密顿量 (6) 只包含偶算符, 已经对角化, 从而能够使四分量旋量波函数的上下二分量子旋不再混合, F-W 变换之后的狄拉克方程成为上下二分量子旋的独立方程:

$$i\hbar \frac{\partial \psi''}{\partial t} = H'' \psi'', \quad (8)$$

其中 $\psi'' = e^{-iS'} e^{-iS} \psi$, 为经过两次 F-W 变换之后的四分量旋量. 选取 (8) 式中的正能解对应的二分量子方程, 即只取 ψ'' 的上分量 ϕ'' , H'' 不含时. 可对 ϕ'' 进行时空变量分离, 得到

$$\phi'' = e^{-iEt} u(x, y, z) \quad (9)$$

和定态薛定谔方程

$$H'' u(x, y, z) = E u(x, y, z), \quad (10)$$

其中 $E = k^2/2m$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$. (10) 式在柱

坐标系中的形式为

$$\Delta u - (2mV(R) + \xi(R) \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) u = -k^2 u. \quad (11)$$

在柱坐标系中

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

可以看到在 (10) 式中 u 的两个自旋分量因为存在自旋-轨道耦合项而产生混合, 这是系统中轨道角动量和自旋角动量不守恒的体现, 即 $[L_z, H''] \neq 0$ 和 $[S_z, H''] \neq 0$. 但需要注意的是总角动量依然守恒, $[J_z, H''] = 0$.

2.3 携带总角动量的电子涡旋解

对于自由电子与匀强磁场中的电子两种情形, 虽然轨道角动量不守恒, 但因为没有自旋-轨道耦合, 通过做 F-W 变换, 取 F-W 表象, 可以定义新的守恒轨道角动量和守恒自旋角动量. 一般中心力场中运动的电子, 会受到中心力场势能导致自旋-轨道耦合作用, 使得即使取 F-W 表象, 新的轨道角动量和自旋角动量也不可能守恒. 涡旋波是携带轨道角动量的电子传播态, 轨道角动量守恒保证了涡旋波的稳定性, 其在带自旋的薛定谔方程中即体现为轨道角动量和自旋角动量为守恒量, 自旋自由度与轨道自由度可以分离变量求解, 从而得到涡旋波和自旋相互分离的涡旋结构. 但对于中心力场势能, 电子的狄拉克哈密顿经过 F-W 变化之后, 在非相对论极限下所对应的哈密顿存在自旋-轨道耦合, 导致系统轨道角动量不守恒, 但总角动量守恒. 携带固定总角动量子数 $j = l + 1/2$ 的电子在沿 z 轴传播时所对应的传播解可以用总角动量的本征态即轨道本征波函数和自旋本征波函数的纠缠态表示,

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} e^{il\varphi} a \\ e^{i(l+1)\varphi} b \end{pmatrix}, \quad (12)$$

其中 l 为任意整数; $a(r, z)$ 和 $b(r, z)$ 为轴对称波函数. 将 $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}$ 中的 $\boldsymbol{\Sigma}$ 矩阵的上旋量形式和 \mathbf{L} 在柱坐标下的变换均代入 (11) 式中, 便可得

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} e^{il\varphi} a \\ e^{i(l+1)\varphi} b \end{pmatrix} = -k^2 \begin{pmatrix} e^{il\varphi} a \\ e^{i(l+1)\varphi} b \end{pmatrix}, \quad (13)$$

其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \Delta - 2mV + i\xi(R)\frac{\partial}{\partial\varphi} & -\xi(R)\left(\frac{iz}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - z\frac{\partial}{\partial r} + r\frac{\partial}{\partial z}\right)e^{-i\varphi} \\ -\xi(R)\left(\frac{iz}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} + z\frac{\partial}{\partial r} - r\frac{\partial}{\partial z}\right)e^{i\varphi} & \Delta - 2mV - i\xi(R)\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

将 \mathbf{A} 的表达式代入 (13) 式可得到如下两个方程:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2mV + k^2 - l\xi\right)a = \xi\left(r\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial r} - (l+1)\frac{z}{r}\right)b \quad (15)$$

和

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2mV + k^2 + (l+1)\xi\right)b = \xi\left(z\frac{\partial}{\partial r} - l\frac{z}{r} - r\frac{\partial}{\partial z}\right)a. \quad (16)$$

方程 (15) 和方程 (16) 在 $\xi(R) = 0$ 的无自旋-轨道耦合情形中退化为

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2mV + k^2\right)u(r, z) = 0. \quad (17)$$

这里 $u(r, z)$ 指 $a(r, z)$ 或者 $b(r, z)$, l 为轨道量子数可取任意整数. 对于无自旋-轨道耦合的中心力场, 不失一般性可取 $V = 0$, 在方程 (17) 中做代换:

$$u(r, z) \rightarrow e^{ik_z z} u(r, z). \quad (18)$$

分离传播因子 $e^{ik_z z}$ 得到

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)u(r) + \left(K^2 - \frac{l^2}{r^2}\right)u(R) = 0. \quad (19)$$

这里 $K^2 = k^2 - k_z^2$, 其线性无关的解为贝塞尔函数 $u(r) \sim J_l(Kr)$ 和汉克尔函数 $u(r) \sim H_l(Kr)$, 由此构成的通解不能归一化, 这是因为事实上 (19) 式是自由粒子波函数满足的方程. 为产生空间径向集中的涡旋波, 需要在径向施加物理束缚, 使电子波集中在传播轴附近, 在数学上可以用傍轴近似来实现此束缚 [21,22]:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \approx 2ik\frac{\partial}{\partial z} + k^2, \quad (20)$$

可得

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + 2ik\frac{\partial}{\partial z} - \frac{l^2}{r^2}\right)u = 0, \quad (21)$$

这里 $u(r, z)$ 是轴对称的束缚解, 做变换

$$u(r, z) = L(r, z) \exp\left[-i\left(\frac{Q(z)}{2}r^2 + P(z)\right)\right], \quad (22)$$

其中 $L(r, z)$, $Q(z)$, $P(z)$ 为关于变量 r, z 的函数. 可分离方程 (21) $r \rightarrow \infty$ 的渐近解形式, 得到

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2}{\partial r^2}L(r, z) + \left(\frac{1}{r} - 2irQ(z)\right)\frac{\partial}{\partial r}L(r, z) \\ & + 2ik\frac{\partial}{\partial z}L(r, z) - \left(2mV + \frac{l^2}{r^2}\right)L(r, z) \\ & + \left(k\frac{\partial Q}{\partial z} - Q^2(z)\right)r^2L(r, z) \\ & + \left(2k\frac{\partial P}{\partial z} - 2iQ(z)\right)L(r, z) = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

$\xi \sim V'(R) = 0$ 的情形可忽略势能项 $V(R)$, 通过令

$$k\frac{\partial Q}{\partial z} - Q^2(z) = 0 \quad (24)$$

和

$$2k\frac{\partial P}{\partial z} = 2iQ(z) + \frac{8n+4l}{W^2(z)}, \quad (25)$$

并做变量代换 $\rho(r, z) = \sqrt{2}r/W(z)$ 和 $\tau = \rho^2$, 方程 (23) 化为广义拉盖尔常微分方程:

$$\tau\frac{d^2}{d\tau^2}L(\tau) + (1+l-\tau)\frac{d}{d\tau}L(\tau) + nL(\tau) = 0. \quad (26)$$

其解为广义拉盖尔函数 $L_n^l(\tau)$, 由此可得拉盖尔高斯涡旋解:

$$\begin{aligned} u = N \frac{(\sqrt{2}r)^l}{W^{l+1}(z)} L_n^l\left(\frac{2r^2}{W^2(z)}\right) e^{\left(-\frac{r^2}{W^2(z)}\right)} e^{\left(-ik\frac{r^2}{R(z)}\right)} \\ \times e^{\left(-i(2n+l+1)\arctan\frac{z}{z_R}\right)} e^{ik_z z} e^{il\varphi}, \end{aligned} \quad (27)$$

其中 n 为径向量子数; l 为轨道量子数; $N = \sqrt{\frac{2n!}{\pi!(n+l)!}}$ 为归一化系数; $R(z) = z\left(1 + \frac{z_R^2}{z^2}\right)$ 为螺旋波前的曲率半径, $W(z) = W(0)\left(1 + z^2/z_R^2\right)^{1/2}$ 为每一条电子涡旋线沿传播轴的半径, $W(0)$ 为焦点处的波半径, z_R 为瑞利半径.

对于 $\xi(R) \neq 0$ 的自旋-轨道耦合非退化情形, 欲求方程组 (15) 和 (16) 的传播解我们仿照 $\xi(R) = 0$ 情形中对方程 (17) 处理, 首先分离 $a(r, z)$ 和 $b(r, z)$ 的沿 z 轴的传播因子 $e^{ik_z z}$, 并做傍轴近似 $\frac{\partial^2}{\partial z^2} \approx 2ik\frac{\partial}{\partial z} + k^2$, 得到轴对称径向束缚函数 $a'(r, z)$ 和 $b'(r, z)$ 满足的方程:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} + 2ik\frac{\partial}{\partial z} - 2mV - l\xi\right)a' = \xi\left(r\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial r} + ikr - (l+1)\frac{z}{r}\right)b', \quad (28)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)^2}{r^2} + 2ik\frac{\partial}{\partial z} - 2mV + (l+1)\xi\right)b' = \xi\left(z\frac{\partial}{\partial r} - r\frac{\partial}{\partial z} - l\frac{z}{r} - ikr\right)a', \quad (29)$$

其中, $a = e^{ikz}a'$, $b = e^{ikz}b'$, 由于中心力场的势能项 V 不再是常值以及自旋-轨道耦合项 ξ 的存在, 方程 (17) 的分离变量条件 (24) 和 (25) 并不能使方程组 (28) 和 (29) 分离变量, 自旋-轨道耦合项 ξ 导致 $a(r, z)$ 和 $b(r, z)$ 耦合, 而势能项 V 和耦合项 ξ 则都导致分离变量的方法不再适用. 即使忽略自旋-轨道耦合项 ξ 的效应, 自由粒子情况的涡旋解也会被势能修正, 不再是严格的高斯-拉盖尔型涡旋, 原则上其解依然具有涡旋波的特征, 等相面具有近似螺旋面的形状, 在远离 z 轴的区域, 波幅迅速衰减. 自旋-轨道耦合项 ξ 的存在使得泡利方程的二分量旋量的两个自旋分量是分别具有相差 \hbar 的轨道角动量取值的涡旋波, 体系的波函数为自旋波函数与涡旋波函数的纠缠态, 可以视为涡旋波的旋量推广, 相较于无自旋-轨道耦合的系统旋量涡旋波函数有更复杂的结构. 为展示这种结构, 可以借助方程 (17) 的涡旋波解形式, 对方程组 (28) 和 (29) 中

的势能项 V 和耦合项 ξ 进行微扰分析, 将势能项 V 和耦合项 ξ 视为微扰, 零级近似就是拉盖尔-高斯涡旋解 (27).

2.4 旋量涡旋波微扰解

对 a' 和 b' 按势能项 V 和耦合项 ξ 进行微扰展开, 势能项 V 和耦合项 ξ 为零时的轴对称束缚波函数记为零阶波函数, 包含了 V 和 ξ 导致的轴对称束缚波函数一阶修正, 则 $a' = \phi_0 + \phi_1$ 和 $b' = \eta_0 + \eta_1$, 将其代入 (28) 式和 (29) 式, 得到轴对称束缚波函数的零阶近似满足的方程:

$$\frac{\partial^2 \phi_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \phi_0}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2}\phi_0 + 2ik\frac{\partial \phi_0}{\partial z} = 0 \quad (30)$$

和

$$\frac{\partial^2 \eta_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \eta_0}{\partial r} - \frac{(l+1)^2}{r^2}\eta_0 + 2ik\frac{\partial \eta_0}{\partial z} = 0, \quad (31)$$

以及轴对称束缚波函数一阶修正满足的方程:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} + 2ik\frac{\partial}{\partial z}\right)\phi_1 = (2mV + \xi l)\phi_0 + \xi\left(z\frac{\partial}{\partial r} + \frac{z}{r}(l+1) + r\frac{\partial}{\partial z} + ikr\right)\eta_0 \quad (32)$$

和

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)^2}{r^2} + 2ik\frac{\partial}{\partial z}\right)\eta_1 = \xi\left(z\frac{\partial}{\partial r} - r\frac{\partial}{\partial z} - ikr - \frac{lz}{r}\right)\phi_0 + (2mV - \xi(l+1))\eta_0, \quad (33)$$

其中 (30) 式、(31) 式即为 $V = 0$ 情形的方程 (21), 这两个方程的解为拉盖尔-高斯解 [22–24]:

$$\phi_0 = \frac{N}{W(z)}\left(\frac{2r^2}{W^2(z)}\right)^{\frac{l}{2}}\exp\left(i\frac{k}{2(z-iz_R)}r^2\right)L_n^l\left(\frac{2r^2}{W^2(z)}\right)e^{(-i(2n+l+1)\arctan[\frac{z}{z_R}])} \quad (34)$$

和

$$\eta_0 = \frac{N'}{W(z)}\left(\frac{2r^2}{W^2(z)}\right)^{\frac{l+1}{2}}\exp\left(i\frac{k}{2(z-iz_R)}r^2\right)L_n^{l+1}\left(\frac{2r^2}{W^2(z)}\right)e^{(-i(2n+l+2)\arctan[\frac{z}{z_R}])}, \quad (35)$$

其中归一化系数

$$N = \sqrt{\frac{2n!}{\pi!(n+l)!}}, \quad N' = \sqrt{\frac{2n!}{\pi!(n+l+1)!}}, \quad W(z) = W(0)\left(1 + \frac{z^2}{z_R^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

为涡旋半径, $z_R = \frac{k}{2} W^2(0)$ 为瑞利半径.

对于轴对称束缚波函数一阶修正的两个方程, 注意到其与零阶近似的区别在于, 零阶近似的方程为微分算子

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} + 2ik \frac{\partial}{\partial z} \quad (36)$$

的齐次或者无源微分方程, 而一阶修正方程 (32) 和方程 (33) 则为其非齐次或者有源微分方程. 非齐次微分方程的求解可以借助其微分算子的格林函数解得到. 以方程 (32) 为例, 注意到完整波函数与轴对称束缚波函数的关系 (12) 式、(18) 式和傍轴近似 (20) 式, 可得完整波函数一阶修正满足的方程:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right) \phi'_1 = S, \quad (37)$$

其中

$$S = \left(2mV - i\xi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \phi'_0 + \xi \left(z \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial}{\partial z} - \frac{z}{r} + i \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \eta'_0, \quad (38)$$

$\phi'_0 = e^{ikz} e^{il\varphi} \phi_0$, $\phi'_1 = e^{ikz} e^{il\varphi} \phi_1$, $\eta'_0 = e^{ikz} e^{il\varphi} \eta_0$ 以及 $\eta'_1 = e^{ikz} e^{il\varphi} \eta_1$.

方程 (37) 事实上是一个非齐次 Helmholtz 方程, 其格林函数方程为

$$\nabla^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + k^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -4\pi \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (39)$$

其中 $\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ 为 δ 函数, $\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(x - x') \times \delta(y - y') \delta(z - z')$. 方程 (37) 的解可借助格林函数表示为

$$\begin{aligned} \phi'_1(\mathbf{x}) = & \int_V d^3\mathbf{x}' G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) S(\mathbf{x}') \\ & + \oint_{\partial V} ds' \cdot (G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \nabla' \phi'_1 \\ & - \phi'_1(\mathbf{x}') \nabla' G(\mathbf{x}', \mathbf{x})). \end{aligned} \quad (40)$$

对于无界空间 V , 无穷远边界条件为 $\phi'(\mathbf{x}) \rightarrow 0$ 和 $G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \rightarrow 0$, (40) 式中表面 ∂V 上的积分没有贡献. 由此通过求解柱坐标系中 Helmholtz 算子的格林函数 $G'(\mathbf{x}', \mathbf{x})$, 可以得到 ϕ'_1 的具体形式.

3 柱坐标系中 Helmholtz 方程的格林函数

在柱坐标系中格林函数方程 (39) 化为

$$\begin{aligned} \nabla^2 G'(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + k^2 G'(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \\ = -\frac{4\pi}{r} \delta(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(z - z'). \end{aligned} \quad (41)$$

对 (41) 式两端做 φ, z 变量的正交归一函数展开, 由

$$\delta(z - z') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{ik_z(z-z')}, \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \delta(\varphi - \varphi') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dm e^{im(\varphi-\varphi')} \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')} \end{aligned} \quad (43)$$

和

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{1}{4\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{ik_z(z-z')} \\ &\times e^{im(\varphi-\varphi')} g_m(r, r'), \end{aligned} \quad (44)$$

可得径向格林函数 $g_m(r, r')$ 满足的方程:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dg_m}{dr} \right) + \left(K^2 - \frac{m^2}{r^2} \right) g_m = -\frac{4\pi}{r} \delta(r - r'), \quad (45)$$

其中 K 为径向波数, 即 $K^2 = k^2 - k_z^2$. 当 $r \neq r'$ 时, 方程 (45) 有两个线性独立的解, 第一类贝塞尔函数 $J_m(Kr)$ 和第二类贝塞尔函数 $N_m(Kr)$, 对无界空间, $g_m(r, r')$ 满足 $r = 0$ 处有限和 $r \rightarrow \infty$ 处为零的边条件, 可得柱坐标系中的格林函数解为 [25]

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int dk_z e^{ik_z(z-z')} e^{im(\varphi-\varphi')} J_m(Kr_{<}) N_m(Kr_{>}), \quad (46)$$

其中 $r_{<} = \min(r', r)$, $r_{>} = \max(r', r)$, $K = \sqrt{k^2 - k_z^2}$. 由 (40) 式得到

$$\begin{aligned} \phi'_1(\mathbf{x}) &= -\frac{1}{2} \int_0^\infty r' dr' \int_{-\infty}^\infty dz' \int_0^{2\pi} d\varphi' \sum_{m=-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dk_z e^{ik_z(z-z')} e^{im(\varphi-\varphi')} e^{ik_z z'} e^{il\varphi'} J_m(Kr'_{<}) N_m(Kr'_{>}) S' \\ &= -\pi e^{il\varphi} \int_{-\infty}^\infty dz' \int_{-\infty}^\infty dk_z e^{ik_z(z-z')} e^{ik_z z'} \left[\int_0^r r' dr' J_l(Kr') N_l(Kr) + \int_r^\infty r' dr' J_l(Kr) N_l(Kr') \right] S'. \end{aligned} \quad (47)$$

其中 $S' = (2mV + l\xi')\phi_0 + \xi' \left(z' \frac{\partial}{\partial r'} - \frac{z'}{r'}(l+1) + r' \frac{\partial}{\partial z'} + ikz' \right) \eta_0$ 和 $\xi' = \frac{1}{2m} \frac{1}{R'} \frac{dV}{dR'}$.

拉盖尔高斯型涡旋波 ϕ_0 (34) 式和 η_0 (35) 式轴对称束缚部分依赖于量子数 n 和 l , 由于 $L_0^l \left(\frac{2r^2}{W^2(z)} \right) = 1$, 因而 $n = 0$ 时轴对称束缚波函数在空间没有节点, 对应束缚基态, 取 $n = 0, l = 1$ 可得

$$\phi'_1(\mathbf{x}) = -\pi e^{i\varphi} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{ik_z(z-z')} e^{ikz'} \int_0^{\infty} r' dr' J_1(Kr_{<}) N_1(Kr_{>}) S'_{01}, \quad (48)$$

其中

$$S'_{01} = \left\{ \left(2m(R')^{-1} - \frac{1}{2m}(R')^{-3} \right) \phi_0 - \frac{1}{2m}(R')^{-3} \left[\frac{2ikz' + kz_R - 3}{(z' - iz_R)} r' - \frac{ikr'^3}{2(z' - iz_R)^2} \right] \eta_0 \right\}. \quad (49)$$

令 $\rho' = \frac{r'}{W(z')}$, $\rho = \frac{r}{W(z')}$, 则

$$\phi_0(\mathbf{x}') = \frac{N}{W(z')} \rho' e^{-\rho'^2} \exp \left(ik \frac{z' W(0)^2}{2z_R^2} \rho'^2 \right) \exp \left[-2i \arctan \left(\frac{z'}{z_R} \right) \right], \quad (50)$$

$$\eta_0(\mathbf{x}') = \frac{N'}{W(z')} (\rho')^2 e^{-\rho'^2} \exp \left(ik \frac{z' W(0)^2}{2z_R^2} \rho'^2 \right) \exp \left[-3i \arctan \left(\frac{z'}{z_R} \right) \right], \quad (51)$$

$$\begin{aligned} \phi'_1(\rho, \varphi, z) = & -\pi e^{i\varphi} \int_0^{\rho} d\rho' \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(z-z')} e^{ikz'} (N_1(KW(z')\rho')) J_1(KW(z')\rho') S'_{01} \\ & - \pi e^{i\varphi} \int_{\rho}^{\infty} d\rho' \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(z-z')} e^{ikz'} (N_1(KW(z')\rho')) J_1(KW(z')\rho') S'_{01} \end{aligned} \quad (52)$$

和

$$S'_{01} = 2m \frac{\rho'}{\rho_{\text{eff}}} \phi_0 - \frac{1}{2m} \left(\frac{1}{\rho_{\text{eff}}} \right)^3 \left[\frac{\rho'}{W^2(z')} \phi_0 + \frac{\rho'^2}{W(z')} \frac{2ikz' + kz_R - 3}{(z' - iz_R)} \eta_0 - W(z') \frac{ik\rho'^4}{2(z' - iz_R)^2} \eta_0 \right], \quad (53)$$

其中 $\rho_{\text{eff}} = \sqrt{\rho'^2 + z'^2/W^2(z')}$.

4 涡旋结构的数值分析

由 (12) 式, 旋量波函数 u 的上分量为

$$\phi = e^{il\varphi} a = e^{il\varphi} e^{ikz} \phi_0 + \phi'_1(r, \phi, z), \quad (54)$$

从 (47) 式可以得到

$$\phi = e^{il\varphi} \left(e^{ikz} \phi_0 - \pi \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \int_0^{\infty} r' dr' e^{ik_z(z-z')} e^{ikz'} J_l(Kr_{<}) N_l(Kr_{>}) S' \right). \quad (55)$$

因 ϕ 具有 $e^{il\varphi}$ 的因子, 是 L_z 本征值为 l 的本征态, 对 (55) 式进行数值分析, 可以得到轨道量子数 $l = 1$ 时, ρ 为常数面与 ϕ 的等相面上相交出的螺旋线, 见图 1; 以及 ϕ 的螺旋等相位面, 见图 2.

根据得到旋量上分量 ϕ 的方法, 可以得到中心力场下的电子沿 z 轴运动时的旋量下分量解为

$$\eta = e^{i(l+1)\varphi} b = e^{i(l+1)\varphi} e^{ikz} \eta_0 + \eta'_1, \quad (56)$$

式中

$$\eta'_1 = \pi e^{i(l+1)\varphi} \int_0^{\rho} d\rho' \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{ik_z(z-z')} e^{ikz'} J_{l+1}(KW(z')\rho'_{<}) N_{l+1}(KW(z')\rho'_{>}) \sigma'(\mathbf{x}), \quad (57)$$

其中

$$\sigma'(\mathbf{x}') = \frac{2m\rho'}{\rho_{\text{eff}}} \eta_0 + \rho_{\text{eff}}^{-3} \left[\frac{\rho'}{mW^2(z')} \eta_0 + \frac{1}{2m} \left(\frac{1}{W(z')} \frac{(kz_R - 2)\rho'^2}{z - iz_R} - \frac{ikW(z')(\rho')^4}{2(z' - iz_R)^2} \right) \phi_0 \right]. \quad (58)$$

取径向量子数 $n = 0$ 的束缚基态和 $l = 1$, 由 (56) 式给出了旋量下分量等相面与常 ρ 面的螺旋线交线, 见图 3 和图 4, 以及 η 的等相位面, 见图 5.

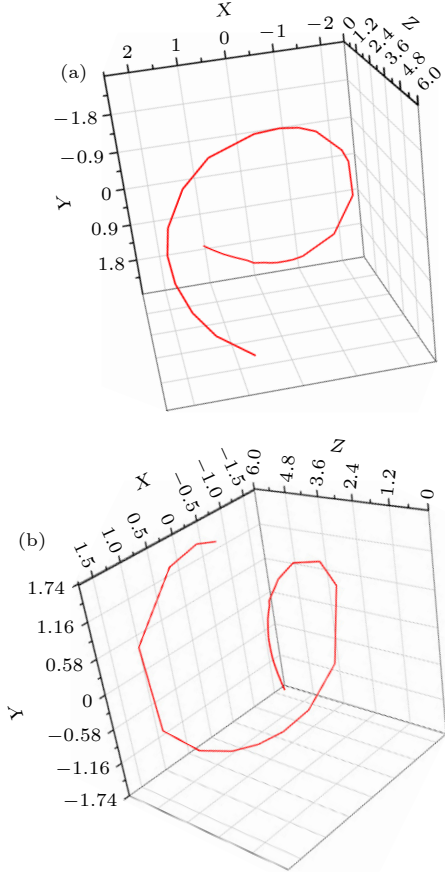


图 1 $l = 1$ 时, 常 ρ 曲面与 ϕ 的等相面上相交出的螺旋线 (其中 $\rho = r/W(z)$ 为无量纲径向坐标参量, $X = x/W(0)$, $Y = y/W(0)$, $Z = z/W(0)$, $x = \rho \sin(\varphi/2)$, $y = \rho \cos(\varphi/2)$, 波形每旋转一周转动波函数 $e^{il\varphi}$ 相位变化 2π) (a) $\rho = 1$ 曲面与 ϕ 的等相面交线; (b) $\rho = 2$ 曲面与 ϕ 的等相面交线

Fig. 1. Spiral line intersected by the equiphase $\phi = \text{constant}$ surface and $\rho = \text{constant}$ surface in case of $l = 1$, where $\rho = r/W(z)$ is the dimensionless radial coordinate parameter and $X = x/W(0)$, $Y = y/W(0)$, $Z = z/W(0)$, $x = \rho \sin(\varphi/2)$, $y = \rho \cos(\varphi/2)$. The phase increase of the rotation wave function $e^{il\varphi}$ is 2π for every periodic rotation of the helix in space. (a) The spiral line intersected by the equiphase $\phi = \text{constant}$ surface and $\rho = 1$ surface; (b) the spiral line intersected by the equiphase $\phi = \text{constant}$ surface and $\rho = 2$ surface.

图 3 和图 4 显示轨道量子数 $l' = l + 1 = 2$ 时, 旋量下分量等相面与等 ρ 面所交螺旋线分为两条, 而图 5 则更明确地表明, 波函数螺旋等相面有两支, 这是因为 φ 初相位选取有 2π 整数倍的不确定

性, 奇数倍和偶数倍选取就会导致相应的笛卡尔坐标 X, Y 反号, 因此导致了图 3、图 4 和图 5 中的一个等相位面分为两支的情形. 更一般地, 对于一般 l 值, 旋转波函数因子 $e^{il\varphi}$ 的初相位有 $2\pi/|l|$ 个可能取值, 每个初相位取值确定等相位面的一支, 每个固定相位, 其等相面就分裂为 $|l|$ 支.

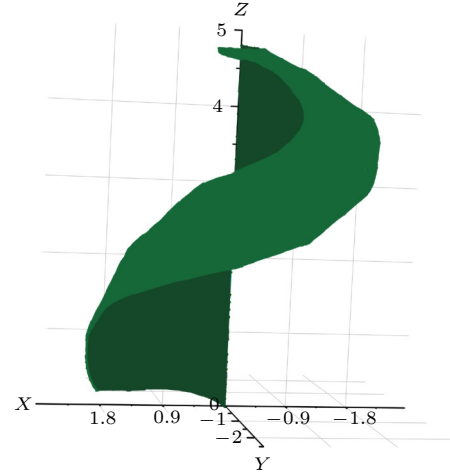


图 2 当携带轨道角动量的电子在中心场中沿 z 轴运动时旋量上分量的解 ϕ 的螺旋等相位面, 轨道量子数 $l = 1$, 波形每旋转一周转动波函数 $e^{il\varphi}$ 相位变化 2π

Fig. 2. Helical equiphase surface of the spinor upper component solution ϕ when the electrons with orbital angular momentum propagate along z -axis and the orbital quantum number is $l = 1$. The phase increase of the rotation wave function $e^{il\varphi}$ is 2π for every periodic rotation of the helix in space.

二分量子旋量作为狄拉克旋量的非相对论极限在 F-W 表象中是狄拉克旋量的上旋量, 经 F-W 逆变换会将上下旋量纠缠起来, 下旋量由上旋量给出, 其在中心力场中的自旋涡旋纠缠态解, 会使狄拉克旋量整体具有涡旋结构, 这样非相对论极限的涡旋解经 F-W 逆变换就可以给出相对论狄拉克旋量的涡旋解^[15].

5 总结和展望

携带轨道角动量的传播电子态其波前呈现螺旋面结构, 这种电子波首先在自由电子系统和匀强磁场的系统中被预言和研究, 对于有自旋-轨道耦合的体系, 我们将涡旋波的概念推广到了具有二维

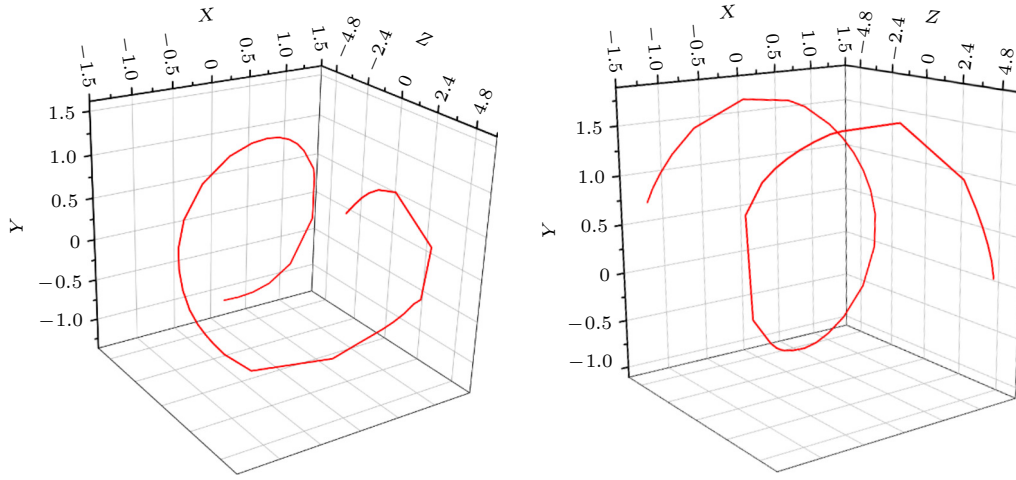


图 3 z 取值从 -6 到 6 时, 旋量下分量等相面与 $\rho = 1.2$ 面所交出的涡旋线, 其中 $X = x/W(0)$, $Y = y/W(0)$, $Z = z/W(0)$, $x = \rho \sin(\varphi/2)$, $y = \rho \cos(\varphi/2)$, $\rho = r/W(z)$, 波形每旋转一周转动波函数 $e^{i(l+1)\varphi}$ 相位变化 4π

Fig. 3. Spiral line intersected by the spinor lower equiphase surface and the $\rho = 1.2$ surface in case of the value of Z ranges from -6 to 6 , where $X = x/W(0)$, $Y = y/W(0)$, $Z = z/W(0)$, $x = \rho \sin(\varphi/2)$, $y = \rho \cos(\varphi/2)$, $\rho = r/W(z)$. The phase increase of the rotation wave function $e^{i(l+1)\varphi}$ is 4π for every periodic rotation of the helix in space.

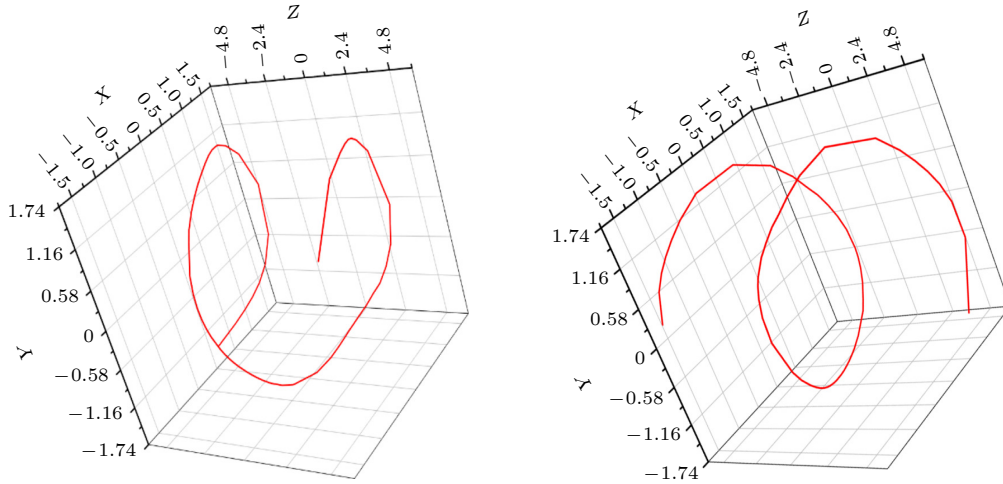


图 4 z 取值从 -6 到 6 时, 旋量下分量等相面与 $\rho = 1.5$ 面所交出的涡旋线, 其中 $X = x/W(0)$, $Y = y/W(0)$, $Z = z/W(0)$, $x = \rho \sin(\varphi/2)$, $y = \rho \cos(\varphi/2)$, $\rho = r/W(z)$, 波形每旋转一周转动波函数 $e^{i(l+1)\varphi}$ 相位变化 4π

Fig. 4. Spiral line intersected by the spinor lower equiphase surface and the $\rho = 1.5$ surface in case of the value of Z ranges from -6 to 6 , where $X = x/W(0)$, $Y = y/W(0)$, $Z = z/W(0)$, $x = \rho \sin(\varphi/2)$, $y = \rho \cos(\varphi/2)$, $\rho = r/W(z)$. The phase increase of the rotation wave function $e^{i(l+1)\varphi}$ is 4π for every periodic rotation of the helix in space.

旋量结构的波函数中, 这种携带总角动量的涡旋电子波可以看成电子自旋态与轨道涡旋态的纠缠态, 是二分量旋量涡旋波, 由狄拉克旋量与其非相对论极限二分量旋量的关系, 讨论了狄拉克旋量涡旋波可以经由二分量旋量做 F-W 逆变换来构造. 我们的研究从相对论情形还是非相对论极限两个角度展示了有自旋-轨道耦合的体系中电子的旋量涡旋态的涡旋构造.

二分量旋量涡旋波的求解过程中, 发展了定态微扰论的思想, 将其改造运用到旋量涡旋波的求解

中. 轨道旋量波的求解借助了光学上的傍轴近似, 这个近似实质上是引入一个等效的束缚势, 使得波函数的轴对称因子呈现束缚态波函数性质. 在旋量波函数的一阶微扰论修正 (32) 式和 (33) 式求解过程中, 为了数学上的方便, 将傍轴近似恢复为严格形式. 这相当于撤去了轴对称的束缚势, 对于涡旋波的轴对称束缚波函数的求解必然存在影响, 但是由于格林函数解 (40) 的形式, 零阶轴对称波函数的束缚解保证了一阶微扰修正的束缚解性质, 零阶波函数借助了傍轴近似, 其效应通过格林函数解的

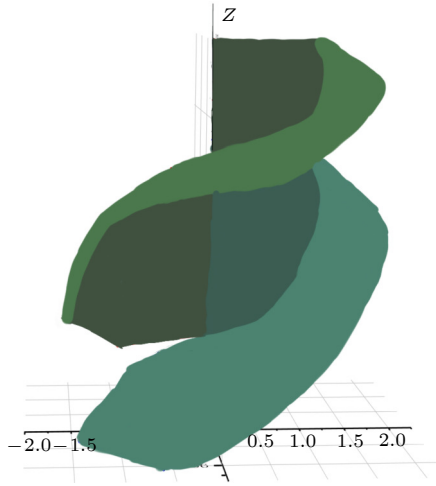


图5 中心力场中携带轨道角动量的电子沿 z 轴传播时其旋量下分量 η 的涡旋解等相面, 所对应的轨道量子数 $l+1=2$, 其中 $X=x/W(0)$, $Y=y/W(0)$, $Z=z/W(0)$, $x=\rho\sin(\varphi/2)$, $y=\rho\cos(\varphi/2)$, $\rho=r/W(z)$, 波形每旋转一周转动波函数 $e^{i(l+1)\varphi}$ 相位变化 4π

Fig. 5. Helical equiphase surface of the spinor lower component solution η when the electrons with orbital angular momentum propagate along z -axis in the central field and corresponding orbital quantum number is $l+1=2$, in which $X=x/W(0)$, $Y=y/W(0)$, $Z=z/W(0)$, $x=\rho\sin(\varphi/2)$, $y=\rho\cos(\varphi/2)$, $\rho=r/W(z)$. The phase increase of the rotation wave function $e^{i(l+1)\varphi}$ is 4π for every periodic rotation of the helix in space.

表达式 (40) 传递给了轴对称波函数的一阶修正, 在一阶修正满足的微分方程中撤去傍轴近似, 对于解的涡旋结构不构成破坏.

对于自旋-轨道耦合的体系, 选取了中心力场诱导的自旋-轨道耦合, 具体求解了这种体系中的旋量涡旋波函数解, 相比于高度理想化的自由电子和匀强磁场体系, 具有自旋-轨道耦合的体系较有普适性, 其旋量涡旋波比单纯的轨道涡旋波有更高的稳定性和实验上的可实现性. 借助旋量涡旋波可以用来研究原子环境或者量子阱等微结构, 也可以用来研究原子核环境中的带轨道角动量的中子和质子现象, 核势能导致的自旋-轨道耦合使得中子和质子旋量涡旋波具有较强的自旋波函数与轨道涡旋波函数的纠缠效应, 这些涡旋波对于研究核势能都是很好的探针. 而且电子涡旋束有望在显微镜分析中带来新的应用, 其中电子束的轨道角动量有

望提供有关样品晶体、图形、电子和磁性成分的新信息. 电子显微镜将使人们能够以原子或接近原子的分辨率绘制磁性信息, 这便可以预期以螺旋电子波在电子显微镜和其他电子探测方面具有广阔前景. 此外电子涡旋态也与量子信息有关, 特别是电子涡旋可能被用来向玻色-爱因斯坦凝聚体中的涡旋传递角动量.

参考文献

- [1] Uchida M, Tonomura A 2010 *Nature* **464** 737
- [2] Verbeeck J, Tian H, Schattschneider P 2010 *Nature* **467** 301
- [3] McMoran B J, Agrawal A, Anderson I M, et al. 2011 *Science* **331** 192
- [4] Schattschneider P, Stoeger-Pollach M, Verbeeck J 2012 *arXiv:1205.2329*
- [5] Guzzinati G, Schattschneider P, Bliokh K Y 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 093601
- [6] Saitoh K, Hasegawa Y, Hirakawa K 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 074801
- [7] Nye J F, Berry M V 1974 *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **336** 165
- [8] Bliokh K Y, Bliokh Y P, Savel'Ev S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 190404
- [9] Bliokh K Y, Dennis M R, Nori F 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 174802
- [10] Schattschneider P, Verbeeck J 2011 *Ultramicroscopy* **111** 1461
- [11] Bliokh K Y, Nori F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 120403
- [12] Karlovets D V 2012 *Phys. Rev. A* **86** 062102
- [13] Van Boxem R, Verbeeck J, Partoens B 2013 *Europhys. Lett.* **102** 40010
- [14] Bliokh K Y, Schattschneider P, Verbeeck J 2012 *Phys. Rev. X* **2** 041011
- [15] Barnett S M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 114802
- [16] Zou L, Zhang P, Silenko A J 2020 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **47** 055003
- [17] Bjorken J D, Drell S D 1964 *Relativistic Quantum Mechanics, Relativistic Quantum Fields* (Mcgraw: Mcgraw-Hill College) pp47–54
- [18] Foldy L L, Wouthuysen S A 1950 *Phys. Rev.* **78** 29
- [19] Silenko A J 2008 *Phys. Rev. A* **77** 012116
- [20] Silenko A J 2008 *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **162** 53
- [21] Siegman A E 1986 *Lasers* (Oxford: Oxford University Press) pp276–279
- [22] Barnett S M 2014 *New J. Phys.* **16** 093008
- [23] Allen L, Beijersbergen M W, Spreeuw R J C 1992 *Phys. Rev. A* **45** 8185
- [24] Allen L, Barnett S M, Padgett M J 2016 *Optical angular momentum* (Boca Raton: CRC Press)
- [25] Jackson J D (translated by Zhu P Y) 1978 *Physics* (Beijing: People's Education Press) pp129–131 (in Chinese) [J D 杰克逊 (朱培豫 译) 1978 物理学 (北京: 人民教育出版社) 第129–131页]

Electron vortices in spin-orbit coupling system^{*}

Zhou Yong-Xiang¹⁾ Xue Xun^{1)2)†}

1) (*Department of Physics, East China Normal University, Shanghai 200241, China*)

2) (*College of Physics and Technology, Xinjiang University, Urumqi 830046, China*)

(Received 19 April 2022; revised manuscript received 29 May 2022)

Abstract

There exists an electron vortex solution with orbital angular momentum quantum in a non-spin-orbit coupling system which has nonconservative orbital angular momentum. We discuss the system with spin-orbit coupling and nonconservative orbital angular momentum, and we can find that the electrons with the total angular momentum numbers also have vortex beam solutions. And the vortex beam is expressed as an entangled wave function of the spin wave function and the vortex wave function. Taking the electrons in the central force field for example, in this paper constructed is a spinor vortex structure which is caused by the propagation of electrons carrying a fixed quantum number of total angular momentum along the z -axis. The spinor vortex structure is under the condition that the orbital angular momentum caused by spin-orbit coupling is non-conserved but the total angular momentum is conserved. The corresponding electron vortex beams in spin-vortex entanglement are solved by perturbation method, and the Foldy-Wouthuysen transformation is utilized to show that the vortex solution of the four-component spinor does exist in the case of relativity, when the electron with a fixed total angular momentum quantum number propagates along the z -axis in the central force field. The spinor provides theoretical support for the existence of the vortex structure for the system where the orbital angular momentum is not conserved but the total angular momentum is conserved due to spin-orbit coupling.

Keywords: relativistic electron vortices, central potential fields, Foldy-Wouthuysen transformation, spin-orbit coupling

PACS: 03.65.-w, 03.65.Ge, 03.65.Pm

DOI: 10.7498/aps.71.20220751

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11775080, 11865016) and the Natural Science Foundation of Chongqing, China (Grant No. CSTB2022NSCQ-MSX0351).

[†] Corresponding author. E-mail: xxue@phy.ecnu.edu.cn

自旋-轨道耦合系统的电子涡旋

周永香 薛迅

Electron vortices in spin-orbit coupling system

Zhou Yong-Xiang Xue Xun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 210301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220751

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220751>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

自旋轨道耦合Su-Schrieffer-Heeger原子链系统的电子输运特性

Electron transport through Su-Schrieffer-Heeger chain with spin-orbit coupling

物理学报. 2021, 70(8): 087301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201742>

梯度磁场中自旋-轨道耦合旋转两分量玻色-爱因斯坦凝聚体的基态研究

Ground state of spin-orbit coupled rotating two-component Bose-Einstein condensate in gradient magnetic field

物理学报. 2018, 67(11): 110302 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180539>

环形势阱中自旋-轨道耦合旋转玻色-爱因斯坦凝聚体的基态

Ground state of spin-orbit coupled rotating ferromagnetic Bose-Einstein condensate in toroidal trap

物理学报. 2020, 69(14): 140301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200372>

自旋轨道耦合量子点系统中的量子相干

Quantum coherence in spin-orbit coupled quantum dots system

物理学报. 2022, 71(7): 078502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212111>

线性塞曼劈裂对自旋-轨道耦合玻色-爱因斯坦凝聚体中亮孤子动力学的影响

Effects of linear Zeeman splitting on the dynamics of bright solitons in spin-orbit coupled Bose-Einstein condensates

物理学报. 2019, 68(8): 080301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182013>

两体相互作用费米系统在自旋轨道耦合和塞曼场中的基态转变

Ground energy level transition for two-body interacting Fermionic system with spin-orbit coupling and Zeeman interaction

物理学报. 2021, 70(8): 083401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201456>