

# Лекция 7

Спин-орбитальное взаимодействие и его влияние на электронную структуру кристаллов  
Понятие Фазы Берри

# Содержание

Спин-орбитальное взаимодействие в квантовой механике.

Влияние спин-орбитального взаимодействия на электронную структуру атомов, сверхтонкое расщепление.

Влияние спин-орбитального взаимодействия на электронную структуру кристаллов. Зонная структура некоторых полупроводников без учёта и с учётом спин-орбитального взаимодействием.

Понятие Фазы Берри

Адиабатическая теорема. Параметрическое пространство Гамильтониана. Кривизна Берри. Калибровочная инвариантность. Аналогия с векторным потенциалом магнитного поля. Геометрическая фаза (фаза Бери) для квантовых состояний электронов в кристаллах.

## Влияние спин-орбитального взаимодействия на электронную структуру атомов, сверхтонкое расщепление

Релятивистская теория спина электрона была предложена Дираком.

В уравнении Шредингера необходимо ввести поправку, возникающую вследствие того, что электрон обладает спином, что обуславливает и наличие у электрона магнитного момента. Это так называемая спин-орбитальная поправка (спинорбитальное взаимодействие).

Спин-орбитальное взаимодействие объясняется тем, что электрон, вращающийся по орбите, создает магнитное поле, в котором сам магнитный момент электрона обладает дополнительной энергией.

Кроме того, оказывается, нужно учесть релятивистскую поправку к кинетической энергии электрона  $\Delta E_{\text{рел}}$ , такая же, по порядку величины, что и  $\Delta E_{ls}$ . Таким образом, используется гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{Ze^2}{r} + \Delta\hat{H}_{\text{рел}} + \Delta\hat{H}_{ls} = H_0 + \Delta H_{\text{рел}} + \Delta H_{ls}$$

Пусть электрон движется в атоме со скоростью  $v$  в центрально-симметричном электрическом поле  $V$ , создаваемом ядром

$$\vec{E} = \frac{1}{e} \frac{\vec{r}}{r} \frac{dV}{dr} \quad c - \text{ скорость света}$$

В системе отсчета электрона это электрическое поле создает магнитное поле

$$\vec{B} = -\frac{1}{c}(\vec{v} \times \vec{E}) = -\frac{1}{mc}(\vec{p} \times \vec{E})$$

Создаваемое магнитное поле взаимодействует с магнитным моментом  $\vec{\mu}$  электрона. Вид оператора

$$\hat{H}_{LS} = -(\vec{\mu} \vec{B})$$

где магнитный момент  $\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \quad \vec{s} = \frac{\vec{\sigma}}{2}$

## Влияние спин-орбитального взаимодействия на электронную структуру атомов, сверхтонкое расщепление

Подставляем выражение для  $V$  и  $\vec{\mu}$

$$\Delta\hat{H}_{ls} = -2\frac{|e|\hbar}{2m_0c} \frac{1}{c} (\vec{s}[\vec{v} \cdot \frac{Z|e|}{r^3}\vec{r}]) = -2\frac{Ze^2\hbar}{2m_0c^2} \frac{1}{r^3} (\vec{s}[\vec{v}\vec{r}])$$

Используем выражение  $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ ,  $l$  - орбитальный момент электрона, в системе отсчета ядра (коэффициент 1/2 связан с изменением системы отсчета и изменением частоты прецессии спина в магнитных полях при этом):

$$\Delta\hat{H}_{ls} = \frac{Ze^2\hbar}{2m_0^2c^2} \frac{1}{r^3} ([\vec{r}\vec{p}]\vec{s}) = \frac{Ze^2\hbar}{2m_0^2c^2} \frac{1}{r^3} (\vec{L}\vec{S})$$

Соответствующая поправка к энергии вычисляется как квантово-механическое среднее по невозмущенным ВФ

$$\Delta E_{ls} = \langle nlm | \Delta\hat{H}_{ls} | nlm \rangle$$

Для водородоподобного атома

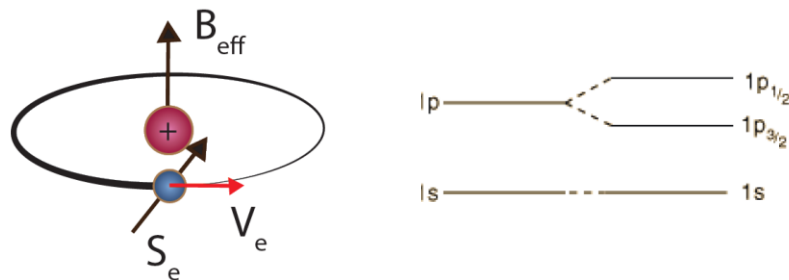
$$\Delta E_{ls} = \frac{1}{2} \frac{m_0c^2(\alpha Z)^4}{n^3l(l+1/2)(l+1)} \begin{cases} l/2 & \text{при } j = l + 1/2, \\ -(l+1)/2 & \text{при } j = l - 1/2 \end{cases}$$

Наличие спин-орбитального взаимодействия объясняет дублетность термов, наблюдаемую в водородоподобных атомах и щелочных металлах

Градиент потенциала  $dV/dr$  пропорционален атомному номеру  $Z$ , поэтому спин-орбитальное взаимодействие играет существенную роль для тяжелых элементов с большим  $Z$ .

## Влияние спин-орбитального взаимодействия на электронную структуру кристаллов

В атоме С.О. взаимодействие приводит к дополнительному расщеплению спектральных термов - так называемая тонкая структура



В рамках данного курса представляет интерес переход от С.О. расщепления внутренних уровней атома к С.О. взаимодействию в валентной зоне электронных состояний твердых тел.

С.О. взаимодействие в твердых телах можно разбить на 2 типа:

1. Независимое от симметрии кристалла. Существует во всех типах кристаллов, происходит от С.О. взаимодействия атомных орбиталей
2. Связанное с нарушением симметрии в кристалле. Распадается на два вида:
  - а)Эффект Дрессельхауса (Нарушение инверсионной симметрии в объеме кристалла)
  - б)Эффект Бычкова-Рашба (Нарушение инверсионной симметрии на поверхности)

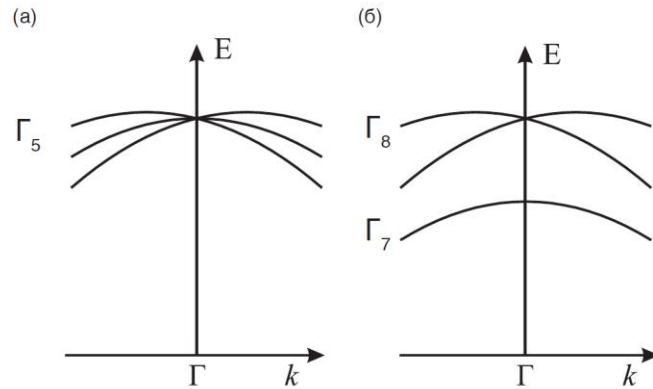
# Зонная структура без учёта и с учётом спин-орбитального взаимодействия

В первом случае необходимо рассматривать классификацию электронных состояний в твердом теле с позиций теории групп. По аналогии с атомом, в котором волновая функция электрона описывается набором квантовых чисел  $|n, l, m_l\rangle$ , в твердом теле можно ввести новый набор  $|k, \Gamma^\delta\rangle$ , где  $k$  - волновой вектор, а  $\Gamma^\delta$  - неприводимые представления.

Для кубических кристаллов полупроводников группа соответствующей симметрии  $O_h$  или  $T_d$  имеет неприводимые представления, которые обозначаются как  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_5$ .

Можно ввести некоторую аналогию между неприводимыми представлениями и атомным угловым моментом.

Представление  $\Gamma_1$ , например, является самым симметричным и может быть сопоставлено с  $l = 0$  в атоме, то есть состоянием  $s$ -типа. Представление  $\Gamma_5$  соответствует связывающим  $p$  - состояниям валентной зоны ( $\Gamma_5^v$ ) и разрыхляющим  $p$  - состояниям зоны проводимости ( $\Gamma_5^c$ ).



Влияние спин-орбитального взаимодействия на состояния  $p$  - типа :  
(а) без СО взаимодействия (б) СО взаимодействие приводит к расщеплению уровней, однако состояния остаются вырожденными по спину

Включение С.О. взаимодействия, как и в случае атома, приводит к поправке по энергии соответствующих уровней и расщеплению состояний. Для кубических кристаллов состояния  $\Gamma_5$  ( $l = 1$ ) расщепляются на  $\Gamma_7$  и  $\Gamma_8$ , а  $\Gamma_1$  не расщепляется, так как имеет нулевой орбитальный момент.

Однако снятие вырождения состояний по спину зависит от наличия у кристалла центра инверсии.

# Зонная структура некоторых полупроводников без учёта и с учётом спин-орбитального взаимодействия

Твердое тело, согласно фундаментальным принципам квантовой механики, обладает симметрией обращения времени, которая означает эквивалентность между волновой функцией  $\psi$  и сопряженной к ней  $\psi^*$  при одновременной инверсии волнового вектора и спина электрона.

Таким образом, в любой точке зоны Бриллюэна (ЗБ) можно записать:  $E(k, \uparrow) = E(-k, \downarrow)$

Если кристаллическая решетка обладает симметрией инверсии, т.е. имеет центр инверсии, то

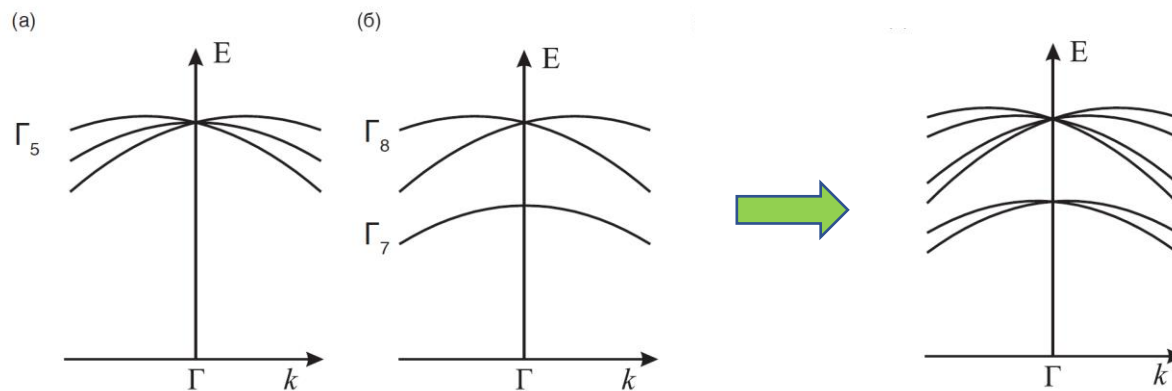
$$E(k, \uparrow) = E(-k, \uparrow), E(k, \downarrow) = E(-k, \downarrow)$$

Объединяя эти условия получаем:  $E(k, \uparrow) = E(k, \downarrow)$

Это означает, что в немагнитных кристаллах с центром инверсии, электронные состояния вырождены по спину.

Спин-орбитальное взаимодействие приводит к снятию вырождения при нарушении трёхмерной симметрии инверсии, и электронные состояния с противоположными проекциями спина имеют различную энергию при одном и том же  $k_{\parallel}$ .

$$E(k_{\parallel}, \uparrow) \neq E(k_{\parallel}, \downarrow)$$



В кристалле без центра инверсии вырождение по спину снимается, приводя к дополнительному расщеплению

Такая спиновая структура наблюдается для большого количества материалов, например полупроводников GaAs, InSb и CdTe.

## Зонная структура полупроводников без центра инверсии снятие вырождения по спину при учёте спин-орбитального взаимодействия

Нарушение инверсионной симметрии в кристалле может также происходить в случае размерного ограничения, например на поверхности. В этом случае наличие поверхностного градиента потенциала приводит к расщеплению электронных состояний по спину - эффект Бычкова-Рашба.

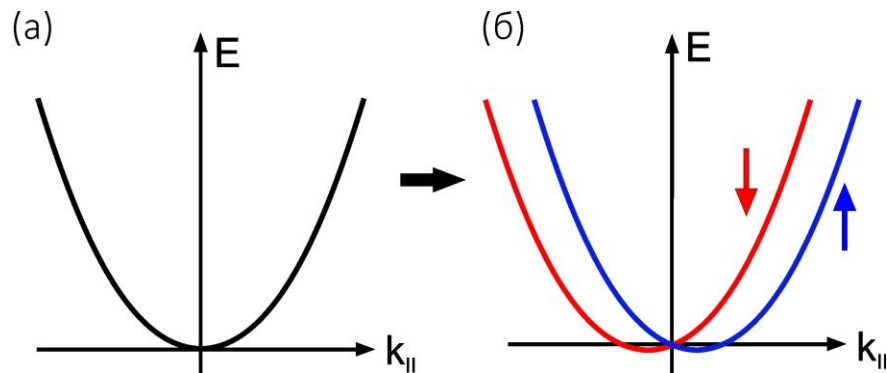
Наиболее ярко выраженное спиновое Рашба расщепление наблюдается у поверхностных состояний. Если в качестве модели рассмотреть двумерный электронный газ с градиентом потенциала, перпендикулярным плоскости поверхности, то при включении С.О. взаимодействия параболическая дисперсия расщепляется на две параболы, сдвинутые по  $k$ .

$$E_{\pm}(k) = \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m^*} \pm \alpha_{RB} |k|$$

$\alpha_B$ - коэффициент Рашба, в который входит как внутриатомный так и поверхностный градиенты потенциала.

Уравнение описывает две параболы электронных состояний с эффективной массой  $m^*$

Можно показать, что спин в такой системе оказывается жестко зафиксирован перпендикулярно вектору квазиимпульса, то есть направлен в плоскости поверхности и имеет геликоидальную структуру.



Дисперсионная зависимость состояний двумерного электронного газа со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы



# Адиабатическая теорема

$H(t)|\psi_n(t)\rangle = E_n(t)|\psi_n(t)\rangle$  Мгновенные собственные вектора и собственные значения гамильтониана  $H(t)$  стационарного УШ

$i\hbar\partial_t|\Psi\rangle = H(t)|\Psi\rangle$  нестационарное УШ

Адиабатическая теорема

$|\Psi(0)\rangle = |\psi_k(0)\rangle$

$\dots \leq E_{k-1}(t) < E_k(t) < E_{k+1}(t) \leq \dots$

$|\Psi(t)\rangle \cong e^{-i\theta_k(t)} e^{-i\gamma_k(t)} |\psi_k(t)\rangle$

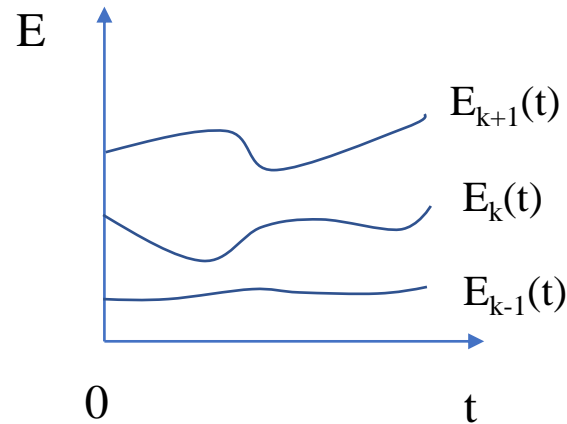
$$\theta_k(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_k(t') dt'$$

$$\nu_k(t) = i \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle$$

$$\gamma_k(t) = \int_0^t \nu_k(t') dt'$$

Таким образом меняется фаза ВФ, которая является ненаблюдаемой величиной

Если состояние системы является суперпозицией двух состояний, одно из которых соответствует одному из состояний – решения стационарного УШ, а вторая – другому, то каждая из них со временем набирает свою фазу, а относительное изменение фаз системы, которое описывается суперпозицией двух состояний, наблюдаемо, и приводит к наблюдаемым эффектам в физических характеристиках

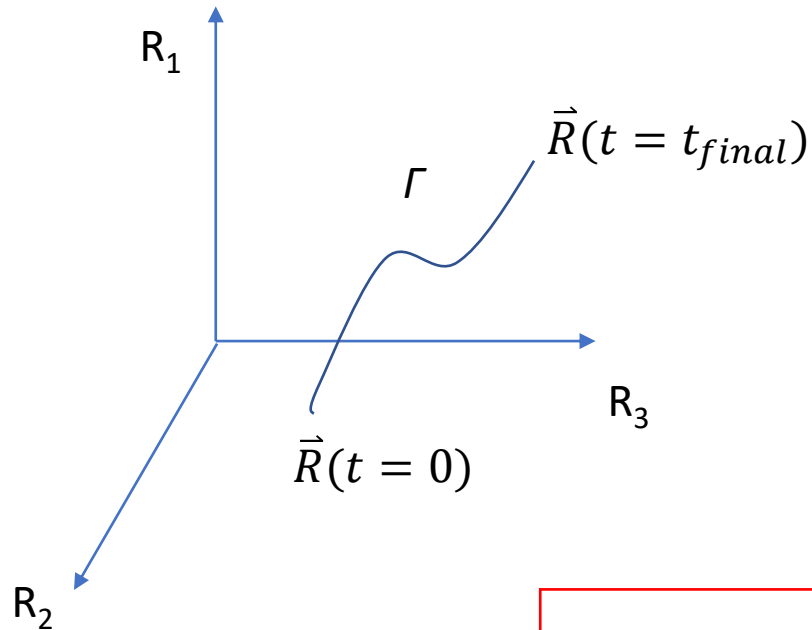


# Конфигурационное пространство для Гамильтониана. Связность Берри.

$$H(\vec{R})$$

$$\vec{R} = (R_1, R_2, \dots, R_N) \in \mathbb{R}^N$$

$$H(\vec{R}) |\psi_n(\vec{R})\rangle = E_n(\vec{R}) |\psi_n(\vec{R})\rangle$$



$$v_k(t) = i \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle$$

$$v_k(t) = i \langle \psi_k(\vec{R}(t)) | \nabla_{\vec{R}} \psi_k(\vec{R}(t)) \rangle \frac{d\vec{R}}{dt}$$



$$\gamma_k(t) = \int_0^t i \langle \psi_k(\vec{R}(t')) | \nabla_{\vec{R}} \psi_k(\vec{R}(t')) \rangle \frac{d\vec{R}}{dt} dt$$

$$\gamma_k(\Gamma) = \int i \langle \psi_k(\vec{R}(t)) | \nabla_{\vec{R}} \psi_k(\vec{R}(t)) \rangle d\vec{R}$$

$$i \langle \psi_k(\vec{R}(t)) | \nabla_{\vec{R}} \psi_k(\vec{R}(t)) \rangle = \vec{A} \quad \text{Связность Берри}$$

## Калибровочное преобразование связности Берри

$$|\psi'_n(\vec{R})\rangle \equiv e^{-i\beta(\vec{R})} |\psi_n(\vec{R})\rangle$$

$$\vec{A}'_k(\vec{R}) \equiv i \langle \psi_k(\vec{R}) | e^{-i\beta(\vec{R})} \nabla_{\vec{R}} | e^{-i\beta(\vec{R})} | \psi_k(\vec{R}) \rangle = \vec{A}_k(\vec{R}) + \nabla_{\vec{R}} \beta(\vec{R})$$

$$\vec{A}'_k(\vec{R}) = \vec{A}_k(\vec{R}) + \nabla_{\vec{R}} \beta(\vec{R})$$

Калибровочное преобразование для связности Берри - также как и вектор потенциал при калибровочном преобразовании он преобразуется градиентом функции в (конфигурационном пространстве, не в реальном пространстве), поэтому он называется связностью

## Фаза Берри

$$\gamma_k(\Gamma) = \int \vec{A}_k(\vec{R}) d\vec{R}$$

$$\gamma'_k(\Gamma) = \int \vec{A}'_k(\vec{R}) d\vec{R} = \int \vec{A}_k(\vec{R}) d\vec{R} + \int_{\vec{R}_i}^{\vec{R}_f} \nabla_{\vec{R}} \beta(\vec{R}) d\vec{R}$$

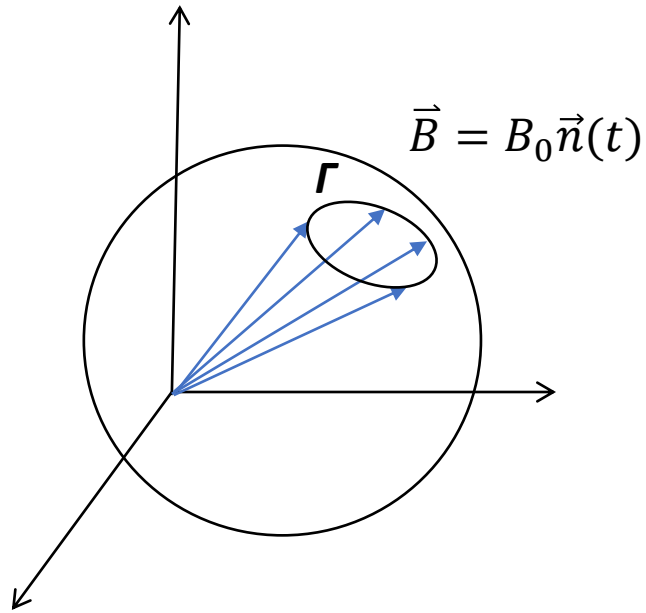
$$\gamma'_k(\Gamma) = \gamma_k(\Gamma) + \beta(\vec{R}_f) - \beta(\vec{R}_i)$$

В общем случае фаза Берри не является калибровочно инвариантной, и поэтому не наблюдаема.

Исключение - траектория в конфигурационном пространстве замкнута

Таким образом наблюдаемая фаза Берри – это геометрическая фаза, которую приобретает система при движении в конфигурационном пространстве, которое начинается и заканчивается в одной точке.

## Пример – спин в магнитном поле



Если это адиабатический процесс, то спин остается в мгновенном основном состоянии, сонаправленным с магнитным полем, и будет следовать изменению магнитного поля.

$\Gamma$  – траектория в конфигурационном пространстве магнитного поля

$$|n + (\text{up state}) \rangle$$

$$\gamma_{|n+\rangle}(\Gamma) = -\frac{1}{2}\Omega$$

$\Omega$  – телесный угол