

5. Spin-orbitální interakce, vrchol valenčního pásu

Stavy elektronu v atomu jsou ovlivněny vnitřním magnetickým polem, vznikajícím orbitálním pohybem. Toto pole se snaží orientovat spinový magnetický moment. Jde o relativistický efekt, v limitě $c \rightarrow \infty$ mizí.

Operátor spinu,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

spin-orbitální interakce v Hamiltoniánu,

$$H_{so} = \frac{1}{2m^2c^2} (\nabla V \times \vec{p}) \cdot \frac{\hbar \vec{\sigma}}{2}. \quad (5.2)$$

Alternativní zápisy používají magnetický moment spojený se spinem elektronu,

$$\vec{\mu} = \frac{-|e|\hbar}{mc} \vec{S} = \frac{-|e|\hbar}{mc} \frac{\vec{S}}{2|\vec{S}|} = \mu_B \frac{\vec{S}}{|\vec{S}|}, \quad (5.3)$$

energii v magnetickém poli s intenzitou H ,

$$H_{so} = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}, \quad (5.4)$$

intenzitu magnetického pole

$$\vec{H} = -\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E}. \quad (5.5)$$

Magnetický moment volného elektronu μ_B (Bohrův magneton) je $9.2740154E-21$ erg/gauss, v SI je to $9.2740154E-24$ J/T ($1 \text{ erg} = 1E-7 \text{ J}$, $1 \text{ gauss} = 1E-4 \text{ T}$), v jednotkách vhodnějších pro studium mikrostruktury hmoty je to zhruba $58 \mu\text{eV/T}$. Magnetické pole Země je při povrchu v rozsahu $25\text{-}65 \mu\text{T}$, silné permanentní neodymové (neodymium-iron-boron) magnety dosahují až 1.3 T .

V izolovaném atomu je

$$H_{SO} = \xi(r)(\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{S} = \xi(r)\vec{L} \cdot \vec{S} , \quad (5.6)$$

kde L je orbitální moment hybnosti. Vezměme například atomový p -stav ($l=1$). Celkový moment hybnosti je reprezentován operátorem

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} . \quad (5.7)$$

Skalární součin je

$$\vec{J} \cdot \vec{J} = (\vec{L} + \vec{S}) \cdot (\vec{L} + \vec{S}) = \vec{L} \cdot \vec{L} + \vec{S} \cdot \vec{S} + (\vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{S} \cdot \vec{L}) , \quad (5.8)$$

kde L a S komutují (operují v různých prostorech). Jejich průměty m_l a m_s ale nejsou dobrá kvantová čísla, protože jsou propojeny SO interakcí, přičemž l a s zůstávají dobrými kvantovými čísly. Vhodnými stavovými vektory pro ocenění velikosti součinu LS jsou tedy

$$|j, l, s, m_j\rangle . \quad (5.9)$$

Ze vztahu (5.8) vychází pro diagonální maticový prvek čtverce celkového momentu hybnosti

$$j(j+1) = l(l+1) + s(s+1) + \frac{2}{\hbar^2} \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle , \quad (5.10)$$

tedy hledaná střední hodnota součinu LS rovna

$$\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] . \quad (5.11)$$

Pro atomové p -stavy ($l=1, s=1/2$) je $j=3/2$ nebo $1/2$, neboli

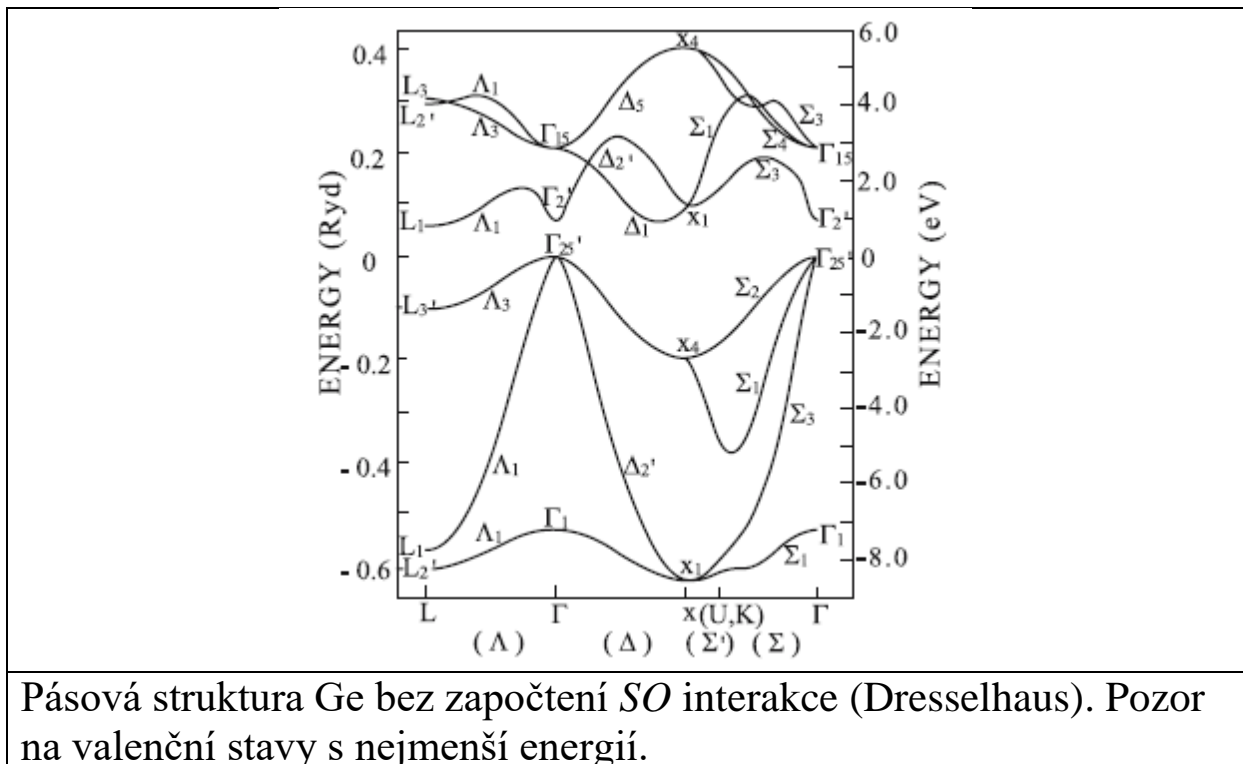
$$\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \text{ pro } j = 3/2, \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = -\hbar^2 \text{ pro } j = 1/2. \quad (5.12)$$

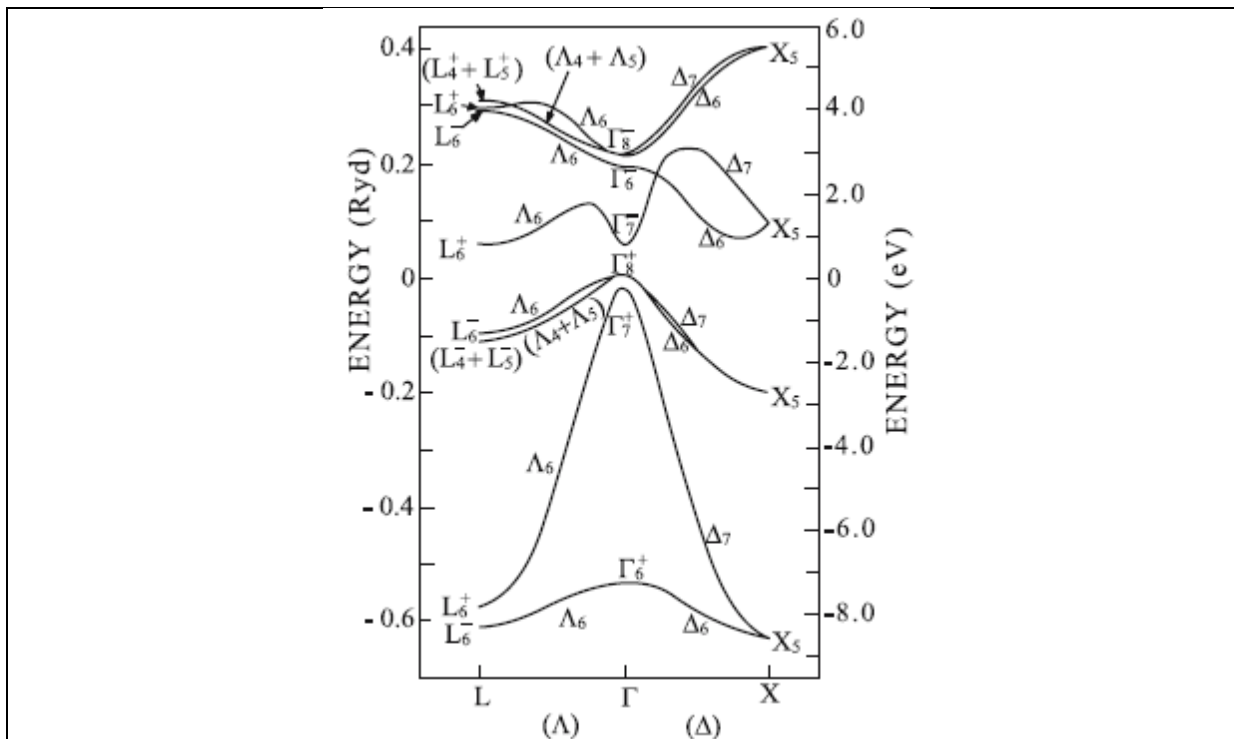
Spin-orbitální interakce tedy odštěpí energie stavů s celkovým momentem hybnosti $3/2$ a $1/2$.

Atomový s -stav není SO interakcí ovlivněn, zůstává spinová degenerace. Atomový d -stav se štěpí na 6-krát degenerovaný $D_{5/2}$ a 4-krát degenerovaný stav $D_{3/2}$.

diamond	$Z = 6$	$\Delta E = 0.006 \text{ eV}$
silicon	$Z = 14$	$\Delta E = 0.044 \text{ eV}$
germanium	$Z = 32$	$\Delta E = 0.29 \text{ eV}$
InSb	$Z = 49$	$\Delta E = 0.9 \text{ eV}$
	$Z = 51$	

Atomová čísla a SO rozštěpení ve vrcholu valenčního pásu.





Pásová struktura Ge se započtením *SO* interakce (Dresselhaus). Pozor na valenční stavy s nejmenší energií.

Dvojně grupy – operace symetrie na spinové proměnné (rotace o 2π změni znaménko stavového vektoru).

	$\{E\}$	$\{3C_2 / 3\hat{E}C_2\}$	$\{6S_4\}$	$\{6\sigma / 6\hat{E}\sigma\}$	$\{8C_3\}$	$\{\hat{E}\}$	$\{6\hat{E}S_4\}$	$\{8\hat{E}C_3\}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	-1	1
Γ_3	2	2	0	0	-1	2	0	-1
Γ_4	3	-1	-1	1	0	3	-1	0
Γ_5	3	-1	1	-1	0	3	1	0
Γ_6	2	0	$\sqrt{2}$	0	1	-2	$-\sqrt{2}$	-1
Γ_7	2	0	$-\sqrt{2}$	0	1	-2	$\sqrt{2}$	-1
Γ_8	4	0	0	0	-1	-4	0	1

Charaktery ireducibilních reprezentací dvojně grupy struktury ZnS ve středu Brillouinovy zóny Γ .

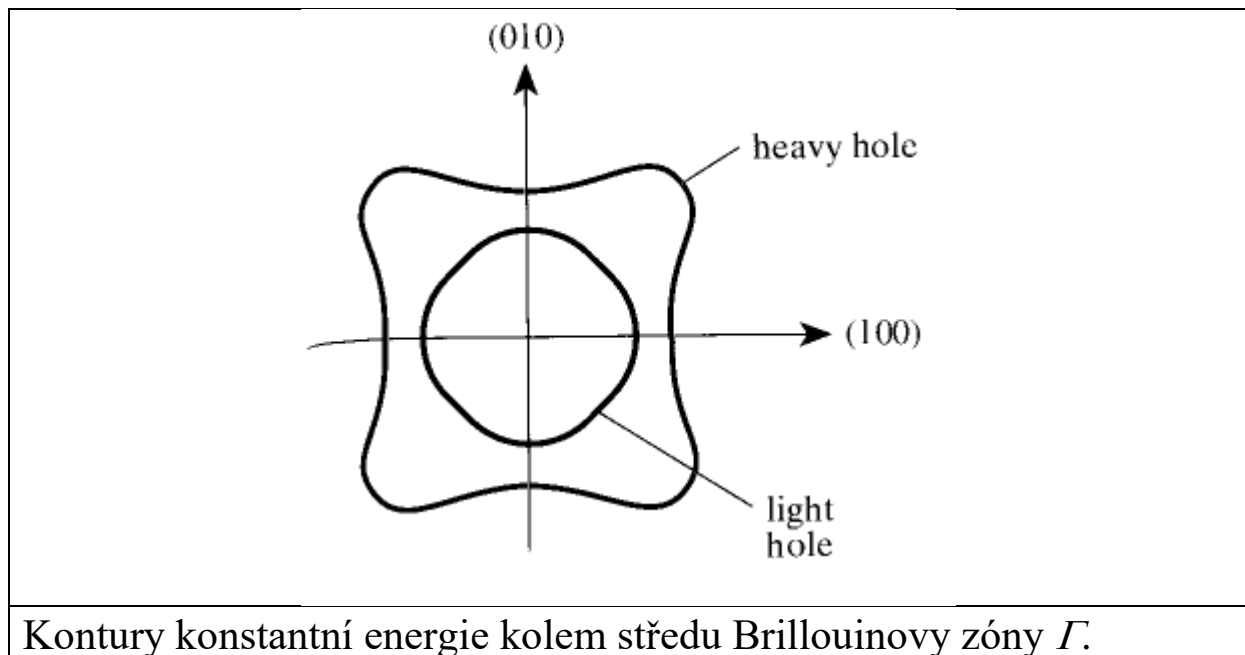
Disperze valenčních stavů („warping“):

$$E_{\pm}(k) = Ak^2 \pm \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_z^2k_y^2 + k_x^2k_z^2)}. \quad (5.13)$$

Table 2.24. Valence band parameters A and B in units of $(\hbar^2/2m)$ and $|C|^2$ in units of $(\hbar^2/2m)^2$. The spin-orbit splitting of the valence bands Δ_0 is given in units of eV. The averaged experimental (exp) and theoretical [th, obtained from A, B, C^2 with (2.67, 69)] values of the effective masses of the heavy hole (hh), light hole (lh) and spin-orbit split-off hole (so) valence bands are in units of the free electron mass. (2.11, 12)

	A	B	$ C ^2$	Δ_0 [eV]	m_{hh}/m_0		m_{lh}/m_0		m_{so}/m_0	
					exp	th	exp	th	exp	th
Si	-4.25	-0.63	24	0.044	0.54	0.45	0.15	0.14	0.23	0.24
Ge	-13.4	-8.5	173	0.295	0.34	0.43	0.043	0.041	0.095	0.1
GaAs	-7.0	-4.5	38	0.341	0.53	0.78	0.08	0.08	0.15	0.17
InP	-5.04	-3.1	41	0.11	0.58	0.53	0.12	0.12	0.12	0.2
InAs	-20.4	-16.6	167	0.38	0.4	0.4	0.026	0.026	0.14	0.10
GaSb	-13.3	-8.8	230	0.75	0.8	0.9	0.05	0.04	—	0.15
InSb	-40.1	-36.2	492	0.81	0.42	0.48	0.016	0.013	—	0.12
GaP	-4.05	-0.98	16	0.08	0.57	0.5	0.18	0.17	—	0.25

Parametry valenčních pásů ve středu Brillouinovy zóny Γ .



Těžko- a lehkoděrový pás, efektivní hmotnost vystředovaná přes směry:

$$\frac{1}{m_{hh}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left[-2A + 2B \left(1 + \frac{2|C|^2}{15B^2} \right) \right], \quad (5.14)$$

$$\frac{1}{m_{lh}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left[-2A - 2B \left(1 + \frac{2|C|^2}{15B^2} \right) \right]. \quad (5.15)$$