

## 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,

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

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  $\mu_B$  (Bohrův magneton) je  $9.2740154 \times 10^{-21}$  erg/gauss, v SI je to  $9.2740154 \times 10^{-24}$  J/T (1 erg =  $10^{-7}$  J, 1 gauss =  $10^{-4}$  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

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

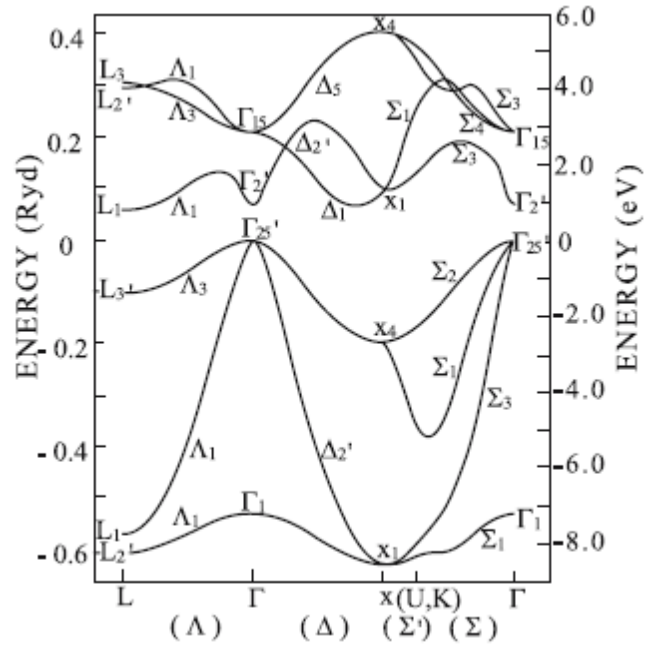
Pro atomové  $p$ -stavy ( $l=1$ ,  $s=1/2$ ) je  $j=3/2$  nebo  $1/2$ , neboli

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

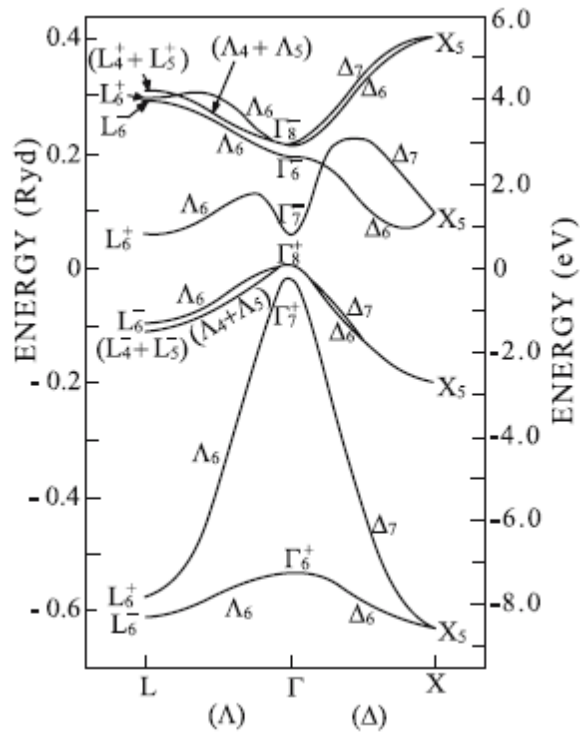
Spin-orbitální interakce tedy odštěpí energie stavů s celkovým momentem hybnosti  $3/2$  a  $1/2$ .  
 Atomový s-stav není  $SO$  interakcí ovlivněn, zůstává spinová degenerace. Atomový  $d$ -stav se štěpí na 6-krát degenerovaný  $D_{5/2}$   
 a 4-krát degenerovaný stav  $D_{3/2}$ .

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 {	$Z = 49$	$\Delta E = 0.9 \text{ eV}$
Sb	$Z = 51$	

Atomová čísla a  $SO$  rozštěpení ve vrcholu valenčního pásu.



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



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

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

	$\{E\}$	$\{3C_2/3\hat{E}C_2\}$	$\{6S_4\}$	$\{6\sigma/6\hat{E}\sigma\}$	$\{8C_3\}$	$\{\hat{E}\}$	$\{6\hat{E}S_4\}$	$\{8\hat{E}C_3\}$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2$	1	1	-1	-1	1	1	-1	1
$\Gamma_3$	2	2	0	0	-1	2	0	-1
$\Gamma_4$	3	-1	-1	1	0	3	-1	0
$\Gamma_5$	3	-1	1	-1	0	3	1	0
$\Gamma_6$	2	0	$\sqrt{2}$	0	1	-2	$-\sqrt{2}$	-1
$\Gamma_7$	2	0	$-\sqrt{2}$	0	1	-2	$\sqrt{2}$	-1
$\Gamma_8$	4	0	0	0	-1	-4	0	1

Charaktery ireducibilních reprezentací dvojné grupy struktury ZnS ve středu Brillouinovy zóny  $\Gamma$ .

Disperze valenčních stavů („warping“):

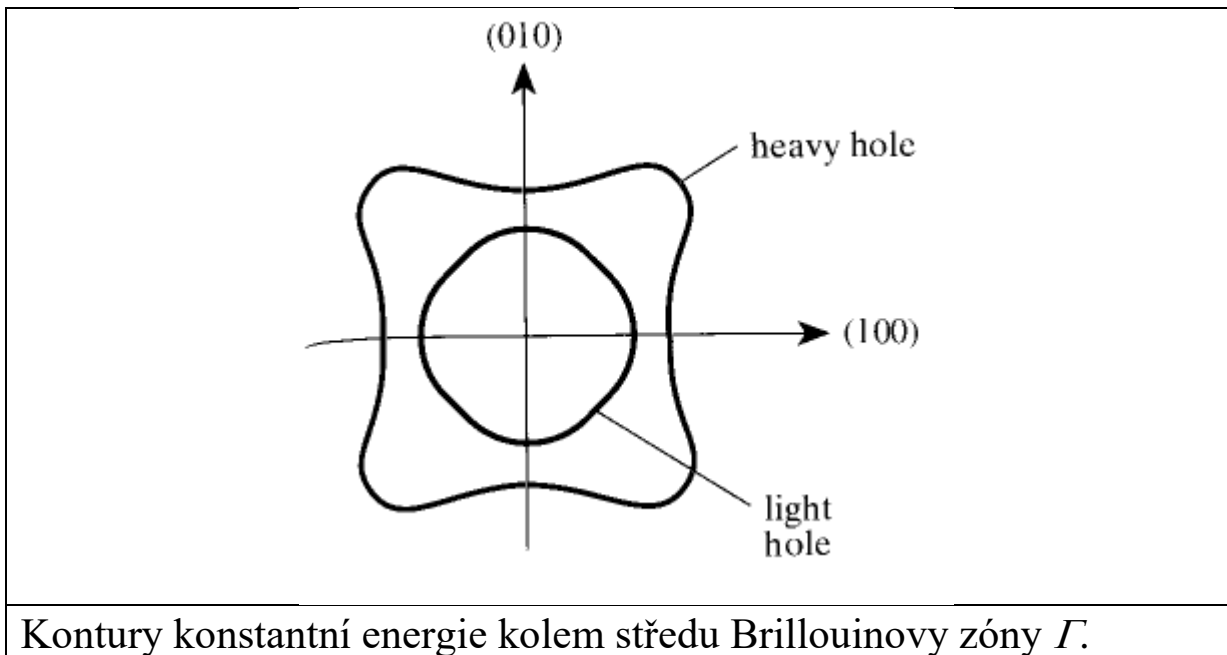
$$E_{\pm}(k) = Ak^2 \pm \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_z^2k_y^2 + k_x^2k_z^2)}. \quad (5.13)$$

**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  $\Delta_0$  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$	$\Delta_0$ [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  $\Gamma$ .





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

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

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