Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4—1965

УДК 533.951.2

М. Е. МАРИНЧУК

ВЛИЯНИЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ЧАСТОТЫ ПЛАЗМЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Методом причинных функций Грина исследуется электронная плазма в полупроводниках со спин-орбитальным взаимодействием в отсутствие магнитного поля. Найдена поправка к предельной частоте плазменных колебаний, обусловленная этим взаимодействием.

В настоящей заметке исследуются плазменные колебания в веществах, в которых проявляется спин-орбитальное взаимодействие в отсутствие магнитного поля. Интересно выяснить, как влияет спин-орбитальное взаимодействие на частоты плазменных колебаний. При решении данной задачи воспользуемся методом функций Грина, изложенным в [1]. В приближении эффективной массы рассмотрим однозонную модель — зону проводимости для электронов.

Как известно [2], спин-орбитальное взаимодействие по-разному проявляет себя в кристаллах в зависимости от того, обладает ли данный кристалл центром инверсии или нет. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия все зоны являются двухкратно вырожденными во всем k-пространстве. Если кристалл обладает центром инверсии, то спин-орбитальное взаимодействие не снимает этого вырождения и энергия электрона по-прежнему зависит только от номера зоны и квазиимпульса (в рассматриваемой нами модели — только от квазиимпульса). В кристаллах, не обладающих центром инверсии (например, InSb), спин-орбитальное взаимодействие снимает это двукратное вырождение — вызывает малое, но конечное расхождение зон, и энергия электрона в отсутствие магнитного поля зависит еще и от спина. В последнем случае спин не является интегралом движения и собственные функции гамильтониана являются линейными комбинациями волновых функций для состояний со спином «вверх» и «вниз». Нас будут интересовать именно кристаллы второго типа.

В качестве невозмущенной задачи рассматриваем задачу об одном электроне в периодическом поле атомных остовов, нейтрализованных остальными электронами, с учетом спин-орбитального взаимодействия. В приближении эффективной массы гамильтониан имеет вид [3]

$$H_0 = \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} + \delta_0 (\vec{\sigma} \hat{\vec{\varkappa}}), \tag{1}$$

где m — эффективная масса, δ_0 — параметр, характеризующий величину расхождения зон, обусловленного спин-орбитальным взаимодействием, $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — матрицы Паули, для которых принято обычное представление

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

оператор $\hat{\varkappa}$ связан с оператором квазиимпульса $\hat{k} = -i\nabla$ следующим образом:

$$\hat{\varkappa}_x = \hat{k}_y \hat{k}_x \hat{k}_y - \hat{k}_z \hat{k}_x \hat{k}_z,$$

($\hat{\varkappa}_y$ и $\hat{\varkappa}_z$ получаются из этого выражения циклической перестановкой индексов).

Величины m и δ_0 зависят от энергии электрона. Однако мы будем пренебрегать этой зависимостью, считая указанные величины постоянными, что можно сделать при не слишком высоких концентрациях электронов [4].

Собственные значения и соответствующие собственные функции гамильтониана (1) имеют вид

$$W_0(\vec{k}, \beta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \beta\delta_0\varkappa, \tag{2}$$

$$\varphi_{\vec{k}\beta}(\vec{r}, s) = V^{-1/2} S_\beta(s)\, e^{i\vec{k}\vec{r}}, \tag{3}$$

где V — объем системы, β — спиновый индекс, принимающий значения ± 1, s — спиновая переменная, $\varkappa$ — модуль вектора с проекциями $\varkappa_x = k_x(k_y^2 - k_z^2)$ и т. д.; спиновая функция $S_\beta(s) = a_\beta S_\uparrow(s) + b_\beta S_\downarrow(s)$.

Функции $S_\uparrow(s)$ и $S_\downarrow(s)$ представляют собой спиновые функции для состояний со спином в положительном и отрицательном направлении оси Oz соответственно; в принятом представлении для матриц Паули они таковы:

$$S_\uparrow(s) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S_\downarrow(s) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Коэффициенты a_β и b_β равны

$$a_{+1} = \sqrt{\frac{\varkappa + \varkappa_z}{2\varkappa}}, \quad b_{+1} = \frac{\varkappa_x + i\varkappa_y}{\sqrt{2\varkappa(\varkappa + \varkappa_z)}};$$

$$a_{-1} = -\frac{\varkappa_x - i\varkappa_y}{\sqrt{2\varkappa(\varkappa + \varkappa_z)}}, \quad b_{-1} = \sqrt{\frac{\varkappa + \varkappa_z}{2\varkappa}}.$$

Если в качестве «одночастичных» функций для перехода к представлению вторичного квантования выбрать функции (3), то обобщенный гамильтониан невзаимодействующего электронного газа с учетом спин-орбитального взаимодействия принимает вид

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},\beta} [W_0(\vec{k}, \beta) - \mu]\, a^+_{\vec{k}\beta} a_{\vec{k}\beta}, \tag{5}$$

где μ — химический потенциал, а $a^{+}_{\vec{k}\beta}$ и $a_{\vec{k}\beta}$ — операторы порождения и уничтожения частиц в состоянии, описываемом волновой функцией (3).

Как известно [1], частоты плазменных колебаний находятся как корни следующего дисперсионного уравнения:

$$1-(2\pi)^8 D_0(\vec{k},\omega)\cdot Re\,\mathscr{P}(\vec{k},\omega)=0, \tag{5а}$$

где причинная функция Грина свободного электромагнитного поля в пренебрежении эффектами запаздывания есть [1]

$$D_0(\vec{k},\omega)=\frac{\hbar}{(2\pi)^4\vec{k}^2}, \tag{5б}$$

а поляризационный оператор:

$$\mathscr{P}(\vec{k},\omega)=\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^7\varepsilon\hbar}\sum_\beta\int d\vec{k}' n_0(\vec{k}',\beta)\times$$

$$\times\left\{\frac{1}{w_0(\vec{k}',\beta)-w_0(\vec{k}'-\vec{k},\beta)-\hbar\omega+i\eta}+\frac{1}{w_0(\vec{k}',\beta)-w_0(\vec{k}'+\vec{k},\beta)+\hbar\omega+i\eta}+\right.$$

$$\left.+\frac{4i\eta n_0(\vec{k}'-\vec{k},\beta)}{[w_0(\vec{k}'-\vec{k},\beta)-w_0(\vec{k}',\beta)+\hbar\omega]^2+\eta^2}\right\}.$$

Здесь ε — диэлектрическая проницаемость, $n_0(\vec{k},\beta)$ — среднее число заполнения состояния $\varphi_{\vec{k}\beta}(\vec{r},s)$ в отсутствие межэлектронного взаимодействия. Действительная часть поляризационного оператора

$$Re\,\mathscr{P}(\vec{k},\omega)=\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^7\varepsilon\hbar}\sum_\beta\int d\vec{k}' n_0(\vec{k}',\beta)\times$$

$$\times P\left\{\frac{1}{w_0(\vec{k}',\beta)-w_0(\vec{k}'-\vec{k},\beta)-\hbar\omega}+\frac{1}{w_0(\vec{k}',\beta)-w_0(\vec{k}'+\vec{k},\beta)+\hbar\omega}\right\}. \tag{6}$$

Символ P означает интеграл в смысле главного значения.

Найдем действительную часть поляризационного оператора при достаточно малых $\vec{k}$ (длинные волны). Разлагая по степеням $\vec{k}$ и ограничиваясь членами второго порядка малости, мы приходим к выражению

$$Re\,\mathscr{P}(\vec{k},\omega)=\frac{16e^2}{3(2\pi)^5\varepsilon\hbar}\frac{1}{\omega^2}\mu_{ij}k_ik_j, \tag{6а}$$

где тензор μ_{ij} определен следующим образом:

$$\mu_{ij}=\frac{3}{16\pi\hbar^2}\sum_\beta\int d\vec{k}' n_0(\vec{k}',\beta)\frac{\partial^2 w_0(\vec{k}',\beta)}{\partial k_i'\partial k_j'}. \tag{7}$$

Подстановка (2) в (7) позволяет привести тензор μ_{ij} к виду

$$\mu_{ij}=\frac{3\pi^2}{2m}n\delta_{ij}+\frac{3\delta_0}{16\pi\hbar^2}\nu_{ij}, \tag{8}$$

где n — концентрация электронов, δ_{ij} — символ Кронекера, а ν_{ij} — новый тензор

$$\nu_{ij}=\int d\vec{k}'\left\{n_0(\vec{k}',+1)-n_0(\vec{k},-1)\right\}\frac{\partial^2\varkappa}{\partial k_i'\partial k_j'}.$$

Непосредственные вычисления показывают, что тензор ν_{ij} является диагональным, причем его диагональные матричные элементы равны между собой, т. е. мы можем положить

$$\nu_{ij} = \frac{1}{3}\delta_{ij} Spur\, \nu_{ij} = \frac{1}{3} C\delta_{ij},$$

где

$$C = Spur\, \nu_{ij} = \int d\vec{k}' \{n_0(\vec{k}', +1) - n_0(\vec{k}', -1)\}\, \Delta_{\vec{k}'}\varkappa. \quad (9)$$

Здесь $\Delta_{\vec{k}'}$ означает оператор Лапласа в $\vec{k}'$-пространстве. Нетрудно установить, что $\Delta_{\vec{k}'}\varkappa \geqslant 0$ и что при $\delta_0 < 0$, $C \geqslant 0$, а при $\delta_0 > 0$, $C \leqslant 0$, т. е. произведение $\delta_0 C$ всегда отрицательно. Так как во втором члене (8) содержится множитель δ_0, то мы можем утверждать, что второй член всегда отрицательный, независимо от знака δ_0. Заметим, что независимость плазменной частоты от знака параметра δ_0 следует немедленно из (2), если иметь в виду, что $\beta = \pm 1$. Следовательно, тензор μ_{ij} принимает вид

$$\mu_{ij} = \left(\frac{3\pi^2}{2m} n - \frac{|\delta_0 C|}{16\pi\hbar^2}\right)\delta_{ij}. \quad (10)$$

Подставив (5б), (6а) и (10) в (5а), мы получаем для предельной плазменной частоты следующее выражение:

$$\omega_{pe}^2 = \frac{4\pi n e^2}{\varepsilon m} - \frac{|\delta_0 C| e^2}{6\pi^2\hbar^2\varepsilon}. \quad (11)$$

Таким образом, спин-орбитальное взаимодействие приводит к уменьшению предельной плазменной частоты.

Исследуем зависимость величины C от параметров кристалла в том случае, когда электронный газ вырожден, т. е. для $n_0(\vec{k}, \beta)$ имеем

$$n_0(\vec{k}, \beta) = \Theta(\mu - w_0(\vec{k}, \beta)),$$

где

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x < 0. \end{cases}$$

Из (9) следует, что

$$C = \int d\vec{k}' \Delta_{\vec{k}'}\varkappa, \quad (12)$$

где интегрирование проводится только по объему $\vec{k}'$-пространства, заключенному между двумя поверхностями, на которых $w_0(\vec{k}', \beta) = \mu$ соответственно для состояний с $\beta = +1$ и $\beta = -1$. Эти поверхности находятся: одна — полностью вне невозмущенной сферы Ферми, а другая — полностью внутри нее. Так как спин-орбитальное взаимодействие мало, то эти поверхности незначительно удалены от сферы и можно приближенно проинтегрировать (12), считая относительные расстояния этих поверхностей от сферы малыми. При этом для C получаем выражение

$$C = \frac{8\pi B m \delta_0}{\hbar^2}(3\pi^2 n)^{5/3}. \quad (13)$$

Безразмерная постоянная B равна следующему интегралу по углам

$$B = \frac{1}{4\pi}\int d\varphi\, d\vartheta \sin\vartheta \frac{u(\vartheta,\varphi)}{v(\vartheta,\varphi)};$$

где

$$u(\vartheta,\varphi) = \cos^2\varphi(\sin^4\vartheta\sin^4\varphi - \cos^4\vartheta)^2 +$$
$$+ \sin^2\varphi(\cos^4\vartheta - \sin^4\vartheta\cos^4\varphi)^2 + \frac{1}{4}\sin^4\vartheta\sin^2 2\vartheta\cos^2 2\varphi +$$
$$+ \sin^2 2\vartheta\sin^2 2\varphi[\sin^4\vartheta\cos^2 2\varphi + (\sin^2\vartheta\sin^2\varphi - \cos^2\vartheta)^2 +$$
$$+ (\cos^2\vartheta - \sin^2\vartheta\cos^2\varphi)^2],$$
$$v(\vartheta,\varphi) = \cos^2\varphi(\sin^2\vartheta\sin^2\varphi - \cos^2\vartheta)^2 +$$
$$+ \frac{1}{4}\sin^2 2\vartheta\cos^2 2\varphi + \sin^2\varphi(\cos^2\vartheta - \sin^2\vartheta\cos^2\varphi)^2.$$

Подстановка (13) в (11) приводит к следующему выражению для плазменных частот:

$$\omega_{pe}^2 = \frac{4\pi n e^2}{\varepsilon m} - \frac{4\pi(3\pi^2)^{2/3} B m \delta_0^2 e^2 n^{5/3}}{\varepsilon\hbar}.$$

Считая второй член малым и введя новую эффективную массу

$$m^* \simeq m\left(1 + \frac{Bm^2\delta_0^2(3\pi^2 n)^{2/3}}{\hbar^4}\right),$$

получаем обычную формулу для предельной плазменной частоты

$$\omega_{pe}^2 = \frac{4\pi n e^2}{\varepsilon m^*}.$$

Известно, что эффективная масса, входящая в выражение для частоты плазменных колебаний, представляет собой «оптическую» эффективную массу. Таким образом, величина m^* есть «оптическая» эффективная масса в полупроводниках, в которых существенно спин-орбитальное взаимодействие.

Если параметр δ_0 выразить в атомных единицах (масса свободного электрона $m_0=1$, $e=1$, $\hbar=1$) и считать безразмерную постоянную $B\sim 1$, то для «оптической» эффективной массы получаем

$$m^* \simeq m\left[1 + 9{,}6\left(\frac{m}{m_0}\right)^2 \delta_0^2 (a_B n^{1/3})^2\right],$$

где $a_B = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}$ — боровский радиус.

Оценим поправку, обусловленную спин-орбитальным взаимодействием, для InSb. Из опытов по циклотронному резонансу Дрессельхауз, Кип, Киттель и Вагонер [5] нашли, что $m = 0{,}013\, m_0$. Согласно оценкам Рашбы и Шека [4], параметр $|\delta_0| = 2\cdot 10^2$ ат. ед. При концентрациях электронов $n \sim 10^{18}$ $см^{-3}$ мы находим, что

$$9{,}6\left(\frac{m}{m_0}\right)^2 \delta_0^2 (a_B n^{1/3})^2 \simeq 1{,}8\cdot 10^{-3}.$$

Таким образом, в InSb спин-орбитальное взаимодействие дает малый вклад в «оптическую» эффективную массу, мало изменяя частоты плазменных колебаний.

В заключение приношу глубокую благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и за руководство работой, а также А. Г. Миронову за ряд полезных советов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М., Физматгиз, 1961.
2. Хейне В. Теория групп в квантовой механике. М., ИЛ, 1963.
3. Рашба Э. И., Шека В. И. «Физика твердого тела», **3**, 1735, 1961.
4. Рашба Э. И., Шека В. И. «Физика твердого тела», **3**, 1863, 1961.
5. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., Wagoner G. Phys. Rev., **98**, 556, 1955.

Поступила в редакцию
24. 4 1964 г.

Кафедра
полупроводников