

ВПЛИВ СПІН-ОРБІТАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНІВ У МОДЕЛІ СИЛЬНОГО ЗВ'ЯЗКУ ЗІ СТРУКТУРНОЮ НЕВПОРЯДКОВАНІСТЮ

О. М. Возняк

*Прикарпатський університет імені Василя Стефаника, кафедра фізики твердого тіла,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна*

(Отримано 15 червня 2004 р.; в остаточному вигляді — 11 березня 2005 р.)

Для неупорядкованого твердого тіла з безладом зміщень методом двочасових температурних функцій Гріна розглянуто вплив спін-орбітальної взаємодії на його енергетичний спектр. Рівняння для спектра одержано в наближенні, квадратичному за зміщеннями атомів від вузлів ідеальної кристалічної ґратки. Розрахунки реалізовано для безладу, який базується на лінійному ланцюжку атомів та простій кубічній ґратці.

Ключові слова: енергетичний спектр, спін-орбітальна взаємодія, безлад зміщень.

PACS number(s): 71.15.Fv, 71.55.Jv, 71.70.Ej, 61.43.Er.

I. ВСТУП

Загальний підхід до опису спін-орбітальної взаємодії ґрунтується на використанні релятивістського рівняння Дірака й розкладу його гамільтоніана за степенями v/c з точністю до квадратичних доданків. У цьому випадку спін-орбітальна взаємодія описується з допомогою оператора [1]

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} ([\nabla V(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}], \hat{\sigma}), \quad (1)$$

де $V(\mathbf{r})$ — потенціал, у полі якого рухається електрон, $\nabla V(\mathbf{r})$ — його ґradient,

$\hat{\mathbf{p}}$ — оператор імпульсу електрона,

$\hat{\sigma}$ — Паулі-оператор спіну електрона.

При застосуванні до атомних систем оператор (1) із урахуванням центральної симетрії атомного потенціалу можна записати у вигляді [1,2]

$$\hat{H}_{s-o} = \sum_i a_i \hat{\mathbf{l}}_i \hat{\mathbf{s}}_i, \quad (2)$$

де $\hat{\mathbf{l}}_i = [\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i]$ — оператор моменту імпульсу,

$\hat{\mathbf{s}}_i$ — оператор спіну i -го електрона,

a_i — константа спін-орбітальної взаємодії.

Вплив спін-орбітальної взаємодії на енергетичні рівні атомів унаслідок її слабкості порівняно з атомним потенціалом враховується переважно за теорією збурень. Водночас енергія спін-орбітальної взаємодії може суттєво зміщувати енергетичні рівні, особливо, якщо це стосується атомів важких елементів [2].

У кристалах спін-орбітальна взаємодія зумовлюється взаємодією магнетного моменту електрона з потенціалом ґратки [3–6]. Проте оскільки в міжвузловому просторі кристала ґradient потенціалу є значно меншим, аніж усередині йонної серцевини, то енергія

спін-орбітальної взаємодії у твердих тілах переважно визначається спін-орбітальною взаємодією атома, але не дорівнює їй. При цьому розрахунок константи спін-орбітальної взаємодії не дає задовільного узгодження з експериментом, тому застосування напівемпіричного підходу, коли у формулі (1) використовують константу взаємодії, визначену за величиною спін-орбітального розщеплення, знайдену зі спектроскопічних даних, дає ліпші результати.

Такий напівемпіричний підхід виявився особливо плідним при вивченні спін-орбітальної взаємодії в так званих наносистемах, оскільки вигляд потенціалу у квантових ямах, квантових точках, нанокристалах, нанотрубках і т. ін. відомий недостатньо [7–13]. Для цих об'єктів спін-орбітальну взаємодію прийнято описувати з допомогою двох внесків в ефективний гамільтоніан. Один з них, знаний як модель Рашба, виникає внаслідок асиметрії квантової ями і в інваріантній формі записується як [7–10, 13, 15]

$$\hat{H}_{s-o}^{\alpha} = \alpha [\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}}] \mathbf{n} = \alpha [\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}}]_z, \quad (3)$$

де α — константа спін-орбітальної взаємодії, \mathbf{n} — нормаль до поверхні.

Другий внесок виникає від кубічних за імпульсом доданків в об'ємному гамільтоніані після врахування квантування в напрямку нормалі і має вигляд [10, 13, 14]

$$\hat{H}_{s-o}^{\beta} = \beta (\hat{\sigma}_x \hat{p}_x - \hat{\sigma}_y \hat{p}_y). \quad (4)$$

Константи спін-орбітальної взаємодії в цих виразах різні, зокрема $\beta \sim 0.1\alpha$, а $\alpha \approx (1 - 10) \cdot 10^{-10}$ еВ·см, і визначаються експериментально з результатів дослідження комбінованого й циклотронного резонансу, електронного спінового резонансу, їх оптичних властивостей тощо [16–17]. Подібні схеми використовуються і для аналізу впливу спін-орбітальної взаємодії на властивості неупорядкованих систем [18–20].

II. ГАМІЛЬТОНІАН СИСТЕМИ

У цій праці послідовно розглянуто вплив спін-орбітальної взаємодії на енергетичний спектр твердого тіла, неупорядкованість якого пов'язана з випадковими статичними зміщеннями атомів із вузлів ідеальної кристалічної ґратки. Такий вид неупорядкованості, який ми назвали структурним, часто розглядають при аналізі енергетичного спектра поверхні тіла чи тонкої плівки [17]. Гамільтоніан системи в цьому випадку має вигляд

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_{s-o}, \quad (5)$$

$$\text{де } \hat{H}_o = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}),$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_l V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l),$$

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} ([\nabla V(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}], \hat{\boldsymbol{\sigma}}).$$

У записі вторинного квантування гамільтоніан набирає вигляду

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \sum_{\alpha} H_{i,j}^{(0)} a_{i,\alpha}^+ a_{j,\alpha} + \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\alpha'} \mathbf{T}_{ij}^{\alpha\alpha'} a_{i,\alpha}^+ a_{j,\alpha'}, \quad (6)$$

$$\text{де } H_{ij}^{(0)} = \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H^{(0)} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r},$$

$$T_{ij}^{\alpha\alpha'} = (\mathbf{T}_{ij}, \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\alpha'}),$$

$$\mathbf{T}_{ij} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) [\nabla V(r), \hat{\mathbf{p}}] \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r},$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\alpha\alpha'} = \langle \chi_{\alpha} | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \chi_{\alpha'} \rangle,$$

$a_{i,\alpha}^+$ ($a_{j,\alpha'}$) — оператори породження (знищення) електрона на вузлі i (j) з орієнтацією спіну α (α'),

$\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ — атомна хвильова функція електрона, центрована на i -ому вузлі,

$\chi_1 = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_2 = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ — спінові хвильові функції електрона. Для визначеності вважатимемо функцію $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ атомною хвильовою функцією s -стану.

Якщо атоми твердого тіла зміщені з рівноважного положення \mathbf{R}_l^0 на величину \mathbf{u}_l , то $\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_l^0 + \mathbf{u}_l$. У цьому випадку, вважаючи зміщення малими, потенціальну енергію можна записати як розклад у ряд за зміщеннями. Обмежуючись лише лінійними за зміщеннями доданками, одержимо

$$V(\mathbf{r}) = \sum_l V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0 - \mathbf{u}) \approx \sum_l V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0) - \sum_l (\mathbf{u}_l, \nabla V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0)). \quad (7)$$

У виразі (7) перший доданок відповідає потенціальній енергії ідеального кристала, а другий пов'язаний із відхиленням від ідеальності. Для неупорядкованої системи внесок у гамільтоніан, відповідальний за спін-орбітальну взаємодію, набирає вигляду:

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \sum_l (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, [\nabla V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0), \hat{\mathbf{p}}]) - \frac{\hbar}{4m^2c^2} \sum_{l,\gamma} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, [\nabla(\mathbf{u}_l^\gamma, V^\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0)), \hat{\mathbf{p}}]), \quad (8)$$

$$\text{де } V^\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0) = \frac{\partial V^\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0)}{\partial x_\gamma}.$$

У записі вторинного квантування цей внесок у гамільтоніан є таким:

$$\hat{H}_{s-o} = \sum_{i,j} \sum_{\alpha\alpha'} T_{ij}^{\alpha\alpha'} a_{i,\alpha}^+ a_{j,\alpha'}, \quad (9)$$

де

$$T_{ij}^{\alpha\alpha'} = (\mathbf{T}_{ij}, \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\alpha'}), \quad \mathbf{T}_{ij} = \mathbf{T}_{ij}^{(0)} + \mathbf{T}_{ij}^{(1)},$$

$$\mathbf{T}_{ij}^{(0)} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \sum_l \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i^0) [\nabla V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0), \hat{\mathbf{p}}] \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) d\mathbf{r},$$

$$\mathbf{T}_{ij}^{(1)} = -\frac{\hbar}{4m^2c^2} \sum_{l,\gamma} u_l^\gamma \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i^0) [\nabla V^\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0), \hat{\mathbf{p}}] \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) d\mathbf{r} = -\sum_{l,\gamma} u_l^\gamma \mathbf{A}_{ij,l}^\gamma,$$

$$\mathbf{A}_{ij,l}^\gamma = \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i^0) [\nabla V^\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0), \hat{\mathbf{p}}] \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) d\mathbf{r},$$

$$\mathbf{T}_{ij} = \mathbf{T}_{ij}^{(0)} - \sum_{l,\gamma} u_l^\gamma \mathbf{A}_{ij,l}^\gamma.$$

Якщо кожному вузлові відповідає лише одна базисна функція, то, розкриваючи скалярний добуток $(\mathbf{T}_{ii}, \sigma^{\alpha\alpha'})$, можна ввести оператори спіну на вузлі

$$\hat{S}_i^+ = a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}, \quad \hat{S}_i^- = a_{i\downarrow}^+ a_{i\uparrow}, \quad \hat{S}_i^z = \frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}), \quad (10)$$

через які оператор спін-орбітальної взаємодії виражається як

$$\begin{aligned} \hat{H}_{s-o} &= 2 \sum_i (T_{ii,z} \hat{S}_i^z + T_{ii,x} \hat{S}_i^x + T_{ii,y} \hat{S}_i^y) \\ &= 2 \sum_i \mathbf{T}_{ii} \hat{\mathbf{S}}_i, \end{aligned} \quad (11)$$

де $\mathbf{T} = T_x \mathbf{i} + T_y \mathbf{j} + T_z \mathbf{k}$.

У розгорнутому вигляді, враховуючи, що $\mathbf{T}_{ij} = \mathbf{T}_{ij}^0 - \sum_{l,\gamma} u_l^\gamma \mathbf{A}_{ij,l}^\gamma$, одержаний вираз буде таким:

$$H_{s-o} = 2 \sum_i (\mathbf{T}_{ii}^0, \hat{\mathbf{S}}_i) - 2 \sum_{il} \sum_{\gamma} u_l^\gamma A_{ii,l}^\gamma \hat{\mathbf{S}}_i. \quad (12)$$

Для сферично-симетричного атомного потенціалу й атомних хвильових функцій s -стану $\mathbf{T}_{ii}^{(0)} = 0$, оскільки орбітальний момент електрона в s -стані дорівнює нулеві.

Дорівнює нулеві для цього ж випадку й матричний елемент $\mathbf{T}_{ii}^{(1)}$, якщо взяти до уваги внесок лише від потенціалу "свого" атома ($i = j = l$). Якщо ж $i = j \neq l$, то, враховуючи що для s -стану $\psi(r) = f(r)/4\pi$, а для сферично-симетричного випадку $d\mathbf{r} = 4\pi r^2 dr$, знайдемо, що $\mathbf{T}_{ii}^{(1)}$ відмінний від нуля й дорівнює

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{ii,l}^{(1)} &= \frac{i\hbar^2}{16m^2 c^2} \int \frac{f(|\mathbf{r} - (\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0)|)}{|\mathbf{r} - (\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0)|} \frac{df(|\mathbf{r} - (\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0)|)}{dr} \\ &\times \left[\left\{ u_i^x \frac{d^2 V}{dx^2} \mathbf{i} + u_i^y \frac{d^2 V}{dy^2} \mathbf{j} + u_i^z \frac{d^2 V}{dz^2} \mathbf{k} \right\}, (\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0) \right] dr. \end{aligned} \quad (13)$$

Вираз (13) може бути, на відміну від випадку ідеального кристала, суттєвим унаслідок зміщення атомів із рівноважного стану.

III. РІВНЯННЯ ДЛЯ ФУНКЦІЙ ГРІНА ТА ЙОГО РОЗВ'ЯЗОК

Для дослідження енергетичного спектра використаємо функцію Гріна $G_{ij}^{\alpha\alpha'} = \langle\langle a_{i\alpha} | a_{j\alpha'}^+ \rangle\rangle$, рівняння для якої в енергетичному зображенні має вигляд

$$\begin{aligned} E \langle\langle a_{i\alpha} | a_{j\alpha'}^+ \rangle\rangle_E &= \langle [a_{i\alpha}, a_{j\alpha'}^+] \rangle \\ &+ \langle\langle [a_{i\alpha}, \hat{H}] | a_{j\alpha'}^+ \rangle\rangle_E \end{aligned} \quad (14)$$

і відрізняється від рівняння для ідеального кристала доданком, пов'язаним із спін-орбітальною взаємодією

(внесок у потенціальну енергію від неупорядкованості ми не розглядаємо, хоча він має такий же порядок величини для спрощення розрахунків і вивчення впливу на спектр неупорядкованої системи лише спін-орбітальної взаємодії), який дає в рівняння такий внесок:

$$\begin{aligned} [a_{i\alpha}, \hat{H}_{s-o}] &= -2 \left[a_{i,\alpha}, \sum_n \sum_{l,\gamma} u_l^\gamma (\mathbf{A}_{nn,l}^\gamma, \hat{\mathbf{S}}_n) \right] \\ &= -2 \sum_n \sum_{l,\gamma} u_l^\gamma \mathbf{A}_{nn,l}^\gamma [a_{i,\alpha}^+, \hat{\mathbf{S}}_n]. \end{aligned} \quad (15)$$

Розраховуючи послідовно комутатори $[a_{i\alpha}, S_{n,x}]$ $[a_{i\alpha}, S_{n,y}]$ і $[a_{i\alpha}, S_{n,z}]$ та підставивши їх у доданок, що містить внесок від спін-орбітальної взаємодії, одержимо таке рівняння для функцій Гріна:

$$\begin{aligned} E \langle\langle a_{i\alpha} | a_{j\alpha'}^+ \rangle\rangle &= \delta_{ij} \delta_{\alpha\alpha'} + \sum_n H_{in}^0 \langle\langle a_{n\alpha} | a_{j\alpha'}^+ \rangle\rangle \\ &- \sum_{l,\gamma} (u_l^\gamma \mathbf{A}_{ii,l}^\gamma)_x \left\{ \langle\langle a_{i,\downarrow} | a_{j,\alpha'}^+ \rangle\rangle \delta_{\alpha,\uparrow} + \langle\langle a_{i,\uparrow} | a_{j,\alpha'}^+ \rangle\rangle \delta_{\alpha,\downarrow} \right\} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{l,\gamma} \left(u_l^\gamma \mathbf{A}_{ii,l}^\gamma \right)_y \left(\langle \langle a_{i,\downarrow} | a_{j,\alpha'}^+ \rangle \rangle \delta_{\alpha,\uparrow} - \langle \langle a_{i,\uparrow} | a_{j,\alpha'}^+ \rangle \rangle \delta_{\alpha,\downarrow} \right) \\
 & - \sum_{l,\alpha} \left(u_l^\gamma \mathbf{A}_{ii,l}^\gamma \right)_z \left(\langle \langle a_{i,\uparrow} | a_{j,\alpha'}^+ \rangle \rangle \delta_{\alpha,\uparrow} - \langle \langle a_{i,\downarrow} | a_{j,\alpha'}^+ \rangle \rangle \delta_{\alpha,\downarrow} \right).
 \end{aligned}$$

Увівши матрицю функцій Гріна, яка стосовно спінових змінних є матрицею розмірністю 2×2 ,

$$\hat{G}_{ij} = \begin{pmatrix} G_{ij}^{\uparrow\uparrow} & G_{ij}^{\uparrow\downarrow} \\ G_{ij}^{\downarrow\uparrow} & G_{ij}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \quad (17)$$

і записавши три останні доданки рівняння (16) як $\hat{T}\hat{G}$, де \hat{T} буде матрицею

$$\hat{T}_{ii}^1 = \begin{pmatrix} T_{ii}^{1(z)} & (T_{ii}^1)^* \\ T_{ii}^1 & -T_{ii}^{1(z)} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

а

$$\begin{aligned}
 T_{ii}^1 &= T_{ii}^{1(x)} - iT_{ii}^{1(y)} = - \sum_{l,\gamma} \left(A_{ii,l}^{\gamma(x)} - iA_{ii,l}^{\gamma(y)} \right) u_l^\gamma, \\
 T_{ii}^{1(z)} &= - \sum_{l,\gamma} A_{ii,l}^{\gamma(z)} u_l^\gamma,
 \end{aligned} \quad (19)$$

одержимо рівняння для функцій Гріна в матричній формі

$$E\hat{G}_{ij} = \hat{I}\delta_{ij} + \sum_n \hat{H}_{in}^{(0)} \hat{G}_{ij} + \hat{T}_{ii}^{(1)} \hat{G}_{ij}. \quad (20)$$

Здійснивши перехід у k -простір, отримаємо рівняння для функцій Гріна $\hat{G}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \hat{G}_{ij}^{\alpha\alpha'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}$

$$\begin{aligned}
 (E - H^{(0)}(\mathbf{q})) \hat{G}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} &= \hat{I}\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \\
 &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\gamma} u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{A}^\gamma(\mathbf{k}) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{q}'},
 \end{aligned} \quad (21)$$

де

$$\hat{A}^\gamma(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} A^{\gamma(z)}(\mathbf{k}) & (A^\gamma(\mathbf{k}))^* \\ A^\gamma(\mathbf{k}) & -A^{\gamma(z)}(\mathbf{k}) \end{pmatrix},$$

$$A^\gamma(\mathbf{k}) = A^{\gamma(x)}(\mathbf{k}) + iA^{\gamma(y)}(\mathbf{k}),$$

$$u^\gamma(\mathbf{k}) = \sum_l u_l^\gamma e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l},$$

$$\mathbf{A}^\gamma(\mathbf{k}) = \sum_{i,l} \mathbf{A}_{ii,l}^\gamma e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l)}.$$

Рівняння (21) містять функції Гріна $\hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{q}'}$, для знаходження яких домножмо рівняння (21) на $u^\gamma(\mathbf{k})$ і зробимо заміну $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} - \mathbf{k}$. Тоді

$$\begin{aligned}
 (E - H^{(0)}(\mathbf{q} - \mathbf{k})) u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{q}'} &= u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{I}\delta_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{q}'} \\
 &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}',\gamma'} \hat{A}^{\gamma'}(\mathbf{k}') u^\gamma(\mathbf{k}) u^{\gamma'}(\mathbf{k}') \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{q}'}.
 \end{aligned} \quad (22)$$

Ці рівняння мають величини $u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{q}'}$ і $u^\gamma(\mathbf{k}) u^{\gamma'}(\mathbf{k}') \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{q}'}$, для визначення яких слід записати нові рівняння. Ми ж скористаємося наближеним методом, що базується на застосуванні конфігураційно-усереднених функцій Гріна й обриві ланцюжка рівнянь за допомогою апроксимації вищих функцій Гріна нижчими. Підставою для використання усереднених за всіма конфігураціями функцій Гріна є той факт, що експериментально спостерігаються лише усереднені за всіма можливими випадковими зміщеннями атомів величини. Тоді

$$\begin{aligned}
 (E - H^{(0)}(\mathbf{q})) \overline{\hat{G}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}} &= \hat{I}\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \\
 &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\gamma} \hat{A}^\gamma(\mathbf{k}) \overline{u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{q}'}}},
 \end{aligned} \quad (23)$$

а

$$\begin{aligned}
 (E - H^{(0)}(\mathbf{q} - \mathbf{k})) \overline{u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{q}'}} & \\
 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}',\gamma'} \hat{A}^{\gamma'}(\mathbf{k}') \overline{u^\gamma(\mathbf{k}) u^{\gamma'}(\mathbf{k}') \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{q}'}} & \quad (24)
 \end{aligned}$$

До виразу $u^\gamma(\mathbf{k}) u^{\gamma'}(\mathbf{k}') \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{q}'}$ рівняння (24) застосуємо розщеплення, запропоноване для аморфних магнетиків Канейоші [21], у якому різні \mathbf{u}_i вважаються незалежними, а їх середнє значення, усе-

реднене по всій системі, дорівнює нулеві. Тоді вираз $u^\gamma(\mathbf{k}) u^{\gamma'}(\mathbf{k}') \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{q}'}$ запишемо так:

$$\overline{u^\gamma(\mathbf{k}) u^{\gamma'}(\mathbf{k}') \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{q}'}} \approx \overline{u^\gamma(\mathbf{k}) u^{\gamma'}(\mathbf{k}')}$$

$$\times \overline{\hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{q}'}} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{\gamma, \gamma'}, \quad (25)$$

а враховуючи, що матриці, обернені до діагональних, можна записати як $(E\hat{I})^{-1} = \frac{1}{E}\hat{I}$, одержимо такий вираз для $\overline{u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}, \mathbf{q}'}}$:

$$\overline{u^\gamma(\mathbf{k}) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}, \mathbf{q}'}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} \frac{\hat{A}^\gamma(\mathbf{k}) \overline{\hat{G}_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}}}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})} |u^\gamma(\mathbf{k})|^2. \quad (26)$$

Відтак рівняння для усереднених функцій Гріна набирає форми:

$$\left((E - H^{(0)}(\mathbf{q})) \hat{I} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} |u^\gamma(\mathbf{k})|^2 \frac{\hat{A}^\gamma(\mathbf{k}) \hat{A}^\gamma(-\mathbf{k})}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})} \right) \overline{\hat{G}_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}} = \hat{I} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}. \quad (27)$$

Узявши до уваги, що конфігураційне усереднення квадратів зміщень з ваговою функцією Гаусса дає $\overline{|u_i^\gamma|^2} = \beta^2$, а $\hat{A}^\gamma(\mathbf{k}) \hat{A}^\gamma(-\mathbf{k})$ при врахуванні лише найближчих сусідів має вигляд

$$\left(\hat{A}^\gamma(\mathbf{k}) \right)^2 = \begin{pmatrix} A^\gamma (A^\gamma)^* + (A^{\gamma(z)})^2 & 0 \\ 0 & A^\gamma (A^\gamma)^* + (A^{\gamma(z)})^2 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

одержимо таке рівняння для функцій Гріна:

$$\left(E - H^{(0)}(\mathbf{q}) - \frac{\beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} \frac{(A^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})} \right) \overline{\hat{G}_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}} = \hat{I} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}, \quad (29)$$

де $(A^\gamma(\mathbf{k}))^2 = (A_x^\gamma(\mathbf{k}))^2 + (A_y^\gamma(\mathbf{k}))^2 + (A_z^\gamma(\mathbf{k}))^2$.

Його розв'язком буде

$$\hat{G}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \frac{\delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}}{E - H^{(0)}(\mathbf{q}) - \frac{\beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} \frac{(A^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})}} \hat{I}, \quad (30)$$

Рівняння ж для спектра таке:

$$E - H^{(0)}(\mathbf{q}) - \frac{\beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} \frac{(A^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})} = 0. \quad (31)$$

Уважаючи зміщення малими, можна припустити, що вираз

$$\Sigma(\mathbf{q}, E) = \frac{\beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} \frac{(A^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})} \quad (32)$$

є також малим і за своїм змістом відповідає другому

порядковій теорії збурень за зміщеннями та відіграє ту ж роль, що й масовий оператор квантової теорії поля. $\Sigma(\mathbf{q}, E)$ має особливості на дійсній осі, виділити які можна, зробивши заміну $E = E - i\delta$. Тоді

$$\Sigma(\mathbf{q}, E) = \Sigma'(\mathbf{q}, E) - i \Sigma''(\mathbf{q}, E),$$

а в явному вигляді

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{q}, E) &= \frac{\beta^2}{N} P \sum_{\mathbf{k}, \gamma} \frac{(A^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})} \\ &- i\pi \frac{\beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} (A^\gamma(\mathbf{k}))^2 \delta(E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})). \end{aligned}$$

Таким чином, дійсна частина $\Sigma'(\mathbf{q}, E)$ дорівнює

$$\Sigma'(\mathbf{q}, E) = \frac{\beta^2}{N} P \sum_{\mathbf{k}, \gamma} \frac{(A^\gamma(\mathbf{k}))^2}{E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})} \quad (33)$$

і визначає поправку до спектра, що виникає внаслідок спін-орбітальної взаємодії. Уявна ж частина

$$\Sigma''(\mathbf{q}, E) = -\pi \frac{\beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}, \gamma} (A^\gamma(\mathbf{k}))^2 \delta(E - H^0(\mathbf{q} - \mathbf{k})) \quad (34)$$

пов'язана із загасанням спектра. Для оцінки величини $A^\gamma(k)$, яка входить у вирази (33) і (34) і необхідна для розрахунку спектра та його загасання, приймемо, що для найближчих сусідів

$$A_{ii,l}^\gamma = A = \text{const}, \quad (35)$$

що не дає значної похибки для багатьох видів потенціалів, а для осциляторного потенціалу виконується точно.

IV. ОДНОВИМІРНА ҐРАТКА

Застосуємо одержані результати до одновимірного ланцюжка атомів зі сталою ґратки a . Оскільки при врахуванні лише найближчих сусідів

$$A^\gamma(k) = 2A \cos ka, \quad (36)$$

а

$$H^{(0)}(q - k) = \varepsilon_s - 2V \cos((q - k)a), \quad (37)$$

то масовий оператор набирає вигляду

$$\Sigma(q, E) = \frac{2A^2\beta^2}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{\cos^2 ka}{(E - \varepsilon_s) - 2V \cos((q - k)a)} dk. \quad (38)$$

Зробивши заміну змінних $q - k = k'$, $k = q - k'$, $dk' = dk$, змінивши межі інтегрування на $k'_{\min} = -\frac{\pi}{a} - q$, $k'_{\max} = \frac{\pi}{a} - q$ та виконавши інтегрування для $\Sigma(q, E)$, одержимо

$$\Sigma(q, E) = A^2\beta^2 \frac{(E - \varepsilon_s)}{2V^2} \cos 2qa \quad (39)$$

при $|E - \varepsilon_s| < 2V$ і

$$\Sigma(q, E) = A^2\beta^2 \left(\frac{(E - \varepsilon_s)^2}{V^2 \sqrt{(E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2}} - \frac{(E - \varepsilon_s)}{2V^2} \right) \cos 2qa + A^2\beta^2 \frac{1}{\sqrt{(E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2}} \sin 2qa \quad (40)$$

при $|E - \varepsilon_s| > 2V$.

Рівняння для спектра при $|E - \varepsilon_s| < 2V$ має вигляд

$$(E - \varepsilon_s) + 2V \cos qa + A^2\beta^2 \frac{(E - \varepsilon_s)}{2V^2} \cos 2qa = 0, \quad (41)$$

а спектр визначається виразом

$$E = \varepsilon_s - \frac{2V \cos qa}{1 + \frac{A^2\beta^2}{2V^2} \cos 2qa}. \quad (42)$$

Рівняння для спектра при $|E - \varepsilon_s| > 2V$ є складнішим

$$(E - \varepsilon_s) + 2V \cos qa + A^2\beta^2 \frac{(E - \varepsilon_s)}{2V^2} \cos 2qa - 2A^2\beta^2 \frac{(E - \varepsilon_s)^2}{V^2 \sqrt{(E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2}} \cos 2qa - 4A^2\beta^2 \frac{\sin^2 qa}{\sqrt{(E - \varepsilon_s)^2 - 4V^2}} = 0 \quad (43)$$

і є рівнянням четвертого степеня щодо E . Його наближений розв'язок, коли $|E - \varepsilon_s|$ близьке до $2V$, прямує до нуля при реалістичних значеннях непорядкованості й константи спін-орбітальної взаємодії при всіх значеннях хвильового вектора, крім однієї точки, у якій спектр має сингулярність. Аналіз виразу для загасання, одержаного без будь-яких обмежень енергії електрона

$$\Gamma = \frac{A^2 a \beta^2 \cos^2 qa \sin qa}{2V \left(1 + \frac{A\beta^2}{2V^2} \cos 2qa\right)}, \quad (44)$$

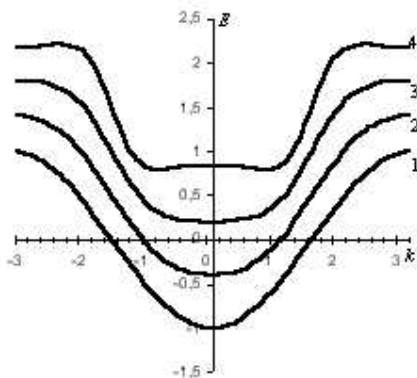


Рис. 1. Енергетичний спектр одновимірної ґратки $E = -\frac{\cos x}{1+C \cos 2x}$, для $1 - C = 0$, $2 - C = 0.1$, $3 - C = 0.25$, $4 - C = 0.5$. На рисунку графік кожної наступної залежності $E(k)$ зміщений щодо попереднього на 0.5 відносної одиниці.

вказує на те, що загасання відсутнє в деякій точці, яка збігається з точкою сингулярності спектра при $|E - \varepsilon_s| > 2V$. Така поведінка спектра і його загасання в цій точці, очевидно, пов'язана з прийнятими в розрахунках наближеннями і є нефізичною.

V. ПРОСТА КУБІЧНА ҐРАТКА

Для простої кубічної ґратки

$$H^{(0)}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = \varepsilon_s - 2V(\cos(q_x - k_x)a + \cos(q_y - k_y)a + \cos(q_z - k_z)a), \quad (45)$$

а

$$A^\gamma(\mathbf{k}) = 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (46)$$

Тоді

$$\Sigma'(\mathbf{q}, E) = \frac{4A^2 \beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)^2}{(E - \varepsilon_s) - 2V(\cos(q_x - k_x)a + \cos(q_y - k_y)a + \cos(q_z - k_z)a)} \quad (47)$$

Зробивши заміну, подібну до заміни, яка була реалізована для одновимірної ґратки: $\mathbf{q} - \mathbf{k} = \mathbf{k}'$, $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{k}'$, $d\mathbf{k}' = d\mathbf{k}$ із відповідною зміною меж інтегрування, одержимо

$$\Sigma'(\mathbf{q}, E) = \frac{4A^2 \beta^2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\cos(q_x - k_x)a + \cos(q_y - k_y)a + \cos(q_z - k_z)a)^2}{(E - \varepsilon_s) - 2V(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)}. \quad (48)$$

Обчислити вираз $\Sigma'(\mathbf{q}, E)$ в аналітичному вигляді не вдається, тому для його оцінки використаємо догохвильове за k наближення для виразу в знаменнику, коли

$$2V(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \approx 2V \left(3 - \frac{k^2 a^2}{2}\right). \quad (49)$$

Обмежившись членами нульового порядку в чисельнику, коли

$$\begin{aligned} & (\cos(q_x - k_x)a + \cos(q_y - k_y)a + \cos(q_z - k_z)a)^2 \\ & \approx (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)^2, \end{aligned} \quad (50)$$

і перейшовши від підсумовування до інтегрування та застосувавши для цього метод Дебая, одержимо

$$\begin{aligned} \Sigma'(\mathbf{q}, E) &= \frac{2A^2 \beta^2 \sqrt[3]{6\pi^2}}{\pi^2 V} (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)^2 \\ &+ \frac{2A^2 \beta^2 \sqrt{E - \varepsilon_s + 6V}}{\pi^2 V^{\frac{3}{2}}} (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)^2 \ln \left| \frac{\sqrt{E - \varepsilon_s + 6V} + \sqrt[3]{6\pi^2 V^{3/2}}}{\sqrt{E - \varepsilon_s + 6V} - \sqrt[3]{6\pi^2 V^{3/2}}} \right|. \end{aligned} \quad (51)$$

Рівняння для спектра, розв'язане для малих $\frac{E - \varepsilon_s}{V}$, дає для нього вираз

$$E = \varepsilon_s - \frac{2V(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)}{1 + \frac{2A^2 \beta^2}{V^2 \sqrt[3]{6\pi^2}} (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)^2} + \frac{2A^2 \beta^2 \left(\frac{\sqrt[3]{6}}{\pi^3} + \frac{12}{\sqrt[3]{6\pi^2}} \right) (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)^2}{V^2 \left(1 + \frac{2A^2 \beta^2}{V^2 \sqrt[3]{6\pi^2}} (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)^2 \right)}. \quad (52)$$

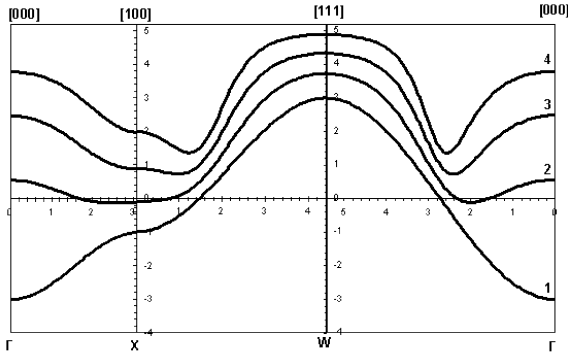


Рис. 2. Енергетичний спектр простої кубічної ґратки $E = -\frac{\cos x + \cos y + \cos z}{1 + C(\cos x + \cos y + \cos z)^2} + \frac{3.5C(\cos x + \cos y + \cos z)^2}{1 + C(\cos x + \cos y + \cos z)^2}$, уздовж напрямків [100], [110], [111] для 1 – $C = 0$, 2 – $C = 0.1$, 3 – $C = 0.25$, 4 – $C = 0.5$.

На рисунку графік кожної наступної залежності $E(k)$ зміщений щодо попереднього на 0.5 відносної одиниці.

VI. ВИСНОВКИ

Для неупорядкованої системи з безладом зміщень у моделі сильного зв'язку зі спін-орбітальною взає-

модією на базисі атомних функцій s -стану одержано рівняння для функцій Гріна і знайдено їх розв'язок у наближенні, квадратичному за зміщеннями атомів від рівноважного положення. Енергетичний спектр і його загасання визначається полюсами усереднених за всіма конфігураціями функцій Гріна. Хоча вплив спін-орбітальної взаємодії в цій моделі визначається лише потенціалами сусідніх атомів, але завдяки неупорядкованості він, на відміну від ідеального кристала, може бути немалим. Розрахунки спектра реалізовано для безладу зміщень лінійного ланцюжка атомів і простої кубічної ґратки. Показано, що при слабкій неупорядкованості та малій константі спін-орбітальної взаємодії вигляд спектра не змінюється, але змінюються такі його параметри, як ефективна маса, кривизна кривої дисперсії енергії. При значній неупорядкованості та великій константі зв'язку, що може реалізуватися в деяких наноструктурах, відбуваються суттєвіші перебудови спектра, які призводять до зміщення екстремумів зон, появи кількох еквівалентних мінімумів тощо.

Автор висловлює подяку В. М. Ткачукові за постійну увагу до роботи й обговорення її результатів.

- [1] І. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (ЛДУ ім. І. Франка, Львів, 1998).
- [2] А. С. Давыдов, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1973).
- [3] Дж. Каллуэй, *Теория энергетической зонной структуры* (Мир, Москва, 1969).
- [4] Дж. Займан, *Вычисление блоховских функций* (Мир, Москва, 1973).
- [5] L. Liu, Phys. Rev. **126**, 1317 (1962).
- [6] R. J. Elliott, Phys. Rev. **96**, 266 (1954).
- [7] Ю. А. Бычков, Э. И. Рашба, Письма журн. эксп. теор. физ. **39**, 66 (1984).
- [8] A. V. Moroz, C. H. W. Barnes, preprint cond-mat/9910466 (1994).
- [9] Р. А. Сурис, Физ. техн. полупр. **20**, 2008 (1986).
- [10] Л. И. Магарилл, Д. А. Романов, А. В. Чаплик, Журн. эксп. теор. физ. **113**, 1411 (1998).
- [11] P. W. Brouwer, J. N. H. J. Cremers, B. J. Halperin. Phys. Rev. B **65**, 081302 (2002).
- [12] Jesus Perez-Conde, A. K. Bhattacharjee, Phys. Rev. B **67**, 235303 (2003).
- [13] S. D. Ganichev *et al*, preprint cond-mat/0306521 (2003).
- [14] N. A. Sinitsyn *et al*, preprint cond-mat/0310315 (2003).
- [15] W. H. Kuan, C. S. Tang, W. Xu, preprint cond-mat/0403098 (2004).
- [16] A. De Martino *et al*, Phys. Rev. Lett. **88**, 206402 (2002).
- [17] Э. И. Рашба, Физ. тверд. тела **11**, 1224 (1960).
- [18] Y. Luanda-Geller, preprint cond-mat/9801095 (1998).
- [19] A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Yu. Kachorovskii, preprint cond-mat/9811035 (1998).
- [20] В. Е. Егорушкин, Е. В. Савушкин, Изв. вузов, физика **8**, 81 (1998).
- [21] T. Kaneyoshi, Phys. Stat. Sol. B. **118**, 757 (1983).

O. M. ВОЗНЯК

**SPIN-ORBIT INTERACTION INFLUENCE ON THE ENERGY SPECTRUM
FOR THE TIGHT-BINDING MODEL WITH A DISPLACEMENT DISORDER**

O. M. Voznjak

*The Precarpathian Vasyl Stefanyk University, Chair of Solid State Physics,
57 Shevchenko St., Ivano-Frankivsk, UA-76025, Ukraine*

The influence of the spin-orbit interaction on the energy spectrum has been investigated by Green's function method for the disordered solid state with the disorder of displacements. The equation for the energy spectrum has been received within the quadratic approximation with respect to the atomic displacements from the equilibrium state of a regular crystal lattice. The computation has been realized for the disordered one-dimensional lattice and the disordered simple cubic lattice.