О.О. ЄРЕМКО,[1] Л.С. БРИЖИК,[1] В.М. ЛОКТЄВ[1,2]

[1] Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
(Вул. Метрологічна, 14-б, Київ 03143)

[2] Національний технічний університет України "КПІ ім. Ігоря Сікорського"
(Просп. Перемоги, 37, Київ 03056)

УДК 530.1, 538.9

УЗАГАЛЬНЕНА СПІН-ОРБІТАЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ ТА ЇЇ ПРОЯВ У ДВОВИМІРНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТРУКТУРАХ

В рамках квантової теорії поля Дірака, що описує електрони і позитрони як елементарні збудження спінорного поля, переходом до нерелятивістського наближення в операторі Гамільтона спінорного поля з урахуванням наявності зовнішнього потенціалу знайдено узагальнений оператор спін-орбітальної взаємодії. Показано, що цей оператор містить окрім відомих доданків також новий внесок. На прикладі модельного потенціалу у вигляді квантової ями показано, що рівняння Шредінгера з таким узагальненим оператором спін-орбітальної взаємодії описує всі спінові стани, одержані з самого рівняння Дірака. Досліджено залежність спін-орбітальної взаємодії від спінового стану у квазідвовимірних локалізованих в площині квантової ями електронних системах. Показано, що електричний струм у шарі квантової ями індукує спінову поляризацію носіїв поблизу граничних поверхонь шару з протилежною поляризацією на протилежних поверхнях, що цілком зумовлено дією узагальненої спін-орбітальної взаємодії і відомо як спіновий ефект Холла, що і спостерігалося експериментально у структурах з подібною геометрією.

Ключові слова: спін-орбітальна взаємодія, рівняння Дірака, рівняння Шредінгера, 2D електронний газ, квантова яма, спіновий ефект Холла.

1. Вступ

Вважається загально визнаним, що як природа, так і величина спін-орбітальної взаємодії (СОВ), що виникає в різних електронних системах, добре відомі та глибоко вивчені [1, 2]. В принципі, така точка зору заперечень не викликає, і можна стверджувати, що СОВ має виключно релятивістське походження. СОВ була введена в рівняння Шредінгера (РШ) на основі деяких емпіричних (фактично класичних) міркувань і відома як поправка Томаса [3] [1]. Оскільки ефект СОВ є суто релятивістським, то тільки теорія Дірака може дати вичерпний його опис. Зазвичай відомі релятивістські поправки в РШ, одна з яких і одержала назву оператора СОВ, знаходяться нерелятивістським граничним переходом у рівнянні Дірака (РД), або методом наближеного перетворення Фолді–Вутхайзена гамільтоніана Дірака за малим параметром v/c, в якому v – характерна швидкість частинок, а c – швидкість світла.

Незважаючи на зазначене, у роботах авторів [5, 6] була зроблена спроба отримати вигляд оператора СОВ, спираючись на безпосередній розв'я-

[1] Доречно, мабуть, нагадати, що ця поправка незалежно та одночасно була виписана також Я.І. Френкелем [4], тому справедливо називати її поправкою Томаса–Френкеля.

зок РД, в якому зовнішній потенціал враховується з самого початку. При цьому було також прийнято до уваги, що існує декілька операторів – так званих спінових інваріантів, які комутують з РД, але не комутують один з одним. З цього, у свою чергу, випливає, що шукані розв'язки РД (навіть отримані в рамках теорії збурень за тим самим малим параметром) можуть бути різними. Іншими словами, це означає, що РД має не один розв'язок, а отже, можливе існування інших поправок до РШ. І дійсно, виявилося, що можна знайти відповідні фізичні розв'язки, або власні функції та власні значення, які різним чином проявляють себе за різних обставин, тобто в залежності від вигляду та форми потенціалу, геометрії системи тощо. Проте знайдені у цих роботах власні значення та власні функції не вирішують задачу остаточно, оскільки виникає проблема встановлення вигляду відповідних поправок, або оператора СОВ в РШ, з урахуванням спінових інваріантів, яким ці розв'язки відповідають.

Саме цій меті і присвячена дана робота, в якій ми спираємось на квантову теорію поля Дірака, що описує електрони і позитрони як елементарні збудження спінорного поля. Переходом до нерелятивістського наближення в операторі Гамільтона спінорного поля з урахуванням наявності зовнішнього потенціалу вдається знайти *узагальнений* оператор СОВ. На прикладі модельного потенціалу у вигляді квантової ями (КЯ) показано, що РШ з узагальненим оператором СОВ описує всі спінові стани, одержані з самого РД [5, 6]. Досліджено залежність СОВ від спінового стану у квазідвовимірних (2D) локалізованих в площині КЯ електронних системах. Нагадаємо, що врахування СОВ та вивчення її наслідків у низьковимірних системах (наприклад, різноманітних гетероструктурах) є актуальною задачею сучасної теоретичної та прикладної фізики твердого тіла.

2. Гамільтоніан частинок у зовнішніх полях

У квантовій теорії поля оператор Гамільтона спінорного поля Дірака має вигляд інтеграла [7, 8]:

$$\mathrm{H} = \int \mathcal{H} d\mathbf{r} = \int \Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\hat{H}_D\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}, \tag{1}$$

де інтегрування здійснюється за всім об'ємом, а чотирикомпонентна функція $\Psi(\mathbf{r},t) = (\psi_1\ \psi_2\ \psi_3\ \psi_4)^T$ (4-спінор або біспінор) є амплітудою спінорного поля, що задовольняє РД

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_D\Psi, \tag{2}$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}_D = c\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)\hat{\boldsymbol{\alpha}} + e\Phi(\mathbf{r})\hat{I} + mc^2\hat{\beta}. \tag{3}$$

Згідно з квантовою механікою, компоненти Ψ є q-числами, $\psi_\nu^\dagger\psi_\mu \neq \psi_\mu\psi_\nu^\dagger$ $(\nu,\mu = 1,2,3,4)$, а оператор $\hat{H}_D$ в (1) та (3) називається гамільтоніаном Дірака. Тут $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ є оператором імпульсу частинки з масою m та зарядом e, $\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_j \mathbf{e}_j\hat{\alpha}_j$ – вектор-матриця, компоненти якої $\hat{\alpha}_j$ $(j = x,y,z)$, як і матриці $\hat{\beta}$ та одинична $\hat{I}$, є ермітові 4-матриці Дірака, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ та $\Phi(\mathbf{r})$ – векторний та скалярний потенціали зовнішнього електромагнітного поля.

Оскільки довільний біспінор $\Psi(\mathbf{r})$ можна представити у вигляді розкладу за повним базисом ортонормованих біспінорів $\Psi_{\{\nu\}}(\mathbf{r})$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\{\nu\}}\hat{c}_{\{\nu\}}\Psi_{\{\nu\}}(\mathbf{r}),$$

гамільтоніан (1) легко записати через оператори народження $\hat{c}^\dagger_{\{\nu\}}$ та знищення $\hat{c}_{\{\nu\}}$, які характеризуються набором квантових чисел $\{\nu\}$. Природним вибором такого базису є власні біспінори рівняння

$$\hat{H}_D^{(0)}\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) = E\Psi^{(0)}(\mathbf{r}), \quad \hat{H}_D^{(0)} = c\hat{\mathbf{p}}\hat{\boldsymbol{\alpha}} + mc^2\hat{\beta}, \tag{4}$$

які описують стаціонарні стани вільних частинок за відсутності зовнішніх полів. При цьому в ролі базисних функцій зручно користуватися плоскими хвилями

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr}) \tag{5}$$

як власними функціями оператора $\hat{\mathbf{p}}$, який для задачі (4) є інтегралом руху. Компоненти хвильового вектора $\mathbf{k}$ визначають власні значення $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ та входять до набору $\{\nu\}$ квантових чисел.

Для умов ортонормування замість неперервного спектра простіше працювати з дискретним, для чого обмежимо простір кубом з ребром L. Вибираючи при цьому для розв'язків циклічні граничні умови, приходимо до квазінеперервних значень компонентів вектора $\mathbf{k} = \sum_j k_j\mathbf{e}_j$

$$k_j = \frac{2\pi}{L}n_j, \quad n_j = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \quad j = x,y,z,$$

де числа n_j набувають всіх значень від $-\infty$ до ∞.

Після підстановки (5) в (4) отримуємо матричне рівняння

$$\begin{pmatrix} mc^2\hat{I}_2 & \hbar c\mathbf{k}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \hbar c\mathbf{k}\hat{\boldsymbol{\sigma}} & -mc^2\hat{I}_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_u \\ \psi_d\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\psi_u \\ \psi_d\end{pmatrix}, \tag{6}$$

де $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ – вектор-матриця, компоненти якої задаються матрицями Паулі, а $\hat{I}_2$ – одинична матриця 2-го порядку. При цьому власний біспінор рівняння (4) набуває форми: $\Psi^{(0)}(\mathbf{k}) = (\psi_u(\mathbf{k})\ \psi_d(\mathbf{k}))^T$, де $\psi_u = (\psi_1\,\psi_2)^T$ та $\psi_d = (\psi_3\,\psi_4)^T$ – його верхній та нижній спінори.

Нескладно знайти розв'язок рівняння (6), власні ортонормовані біспінори якого задаються виразами [1, 2]:

$$\begin{aligned} \Psi^{(0)}_{e,\sigma}(\mathbf{k}) &= A_{\mathbf{k}}\begin{pmatrix} \chi_{e,\sigma} \\ \dfrac{\hbar c\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{\varepsilon(\mathbf{k})+mc^2}\chi_{e,\sigma}\end{pmatrix}, \quad E = \varepsilon(\mathbf{k}), \\ \Psi^{(0)}_{p,\sigma}(\mathbf{k}) &= A_{\mathbf{k}}\begin{pmatrix} -\dfrac{\hbar c\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{\varepsilon(\mathbf{k})+mc^2}\chi_{p,\sigma} \\ \chi_{p,\sigma}\end{pmatrix}, \quad E = -\varepsilon(\mathbf{k}), \end{aligned} \tag{7}$$

в яких введені позначення

$$A_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\varepsilon(\mathbf{k})+mc^2}{2\varepsilon(\mathbf{k})}}, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \sqrt{m^2c^4 + c^2\hbar^2\mathbf{k}^2}. \tag{8}$$

Біспінор $\Psi^{(0)}_{e,\sigma}$ в (7) є амплітудою поля частинок (електронів, e), а $\Psi^{(0)}_{p,\sigma}$ – античастинок (позитронів, p).

Рівняння (6) визначає чотири власні вектори, оскільки є рівнянням на власні значення 4-матриці. Тому в розв'язках (7) введено число σ, що приймає два значення, які приписуються парі ортогональних спінорів: $\chi^\dagger_{\nu,\sigma}\chi_{\nu,\sigma'} = \delta_{\sigma,\sigma'}$. Таким чином, система (7) задає повний набір біспінорів, за допомогою якого можна представити довільний біспінор у формі

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{kr}}\left(a_{\mathbf{k},\sigma}\Psi^{(0)}_{e,\sigma}(\mathbf{k}) + b^\dagger_{-\mathbf{k},\sigma}\Psi^{(0)}_{p,\sigma}(\mathbf{k})\right), \tag{9}$$

де $a_{\mathbf{k},\sigma}/b_{\mathbf{k},\sigma}$ та $a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}/b^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$ є операторами народження та знищення частинок/античастинок. При цьому фізична умова додатної визначеності власних значень гамільтоніана (1) потребує для цих операторів фермієвської статистики.

Тим не менше, визначення біспінорів в (9) не є однозначним, оскільки біспінори (7) задовольняють рівняння (6) при *довільних* спінорах $\chi_{\nu,\sigma}$ ($\nu = e, p$). Тому фізичне значення σ як квантового числа залишається поза кадром. Хоча значення σ можна визначити як ± 1, або $\uparrow, \downarrow$, їх значення як проекцій на ту чи іншу вісь поки відсутнє, оскільки не встановлено напрямок цієї осі, без чого не можна говорити про повне задання стану.

Водночас, відомо, що стаціонарні стани системи характеризуються квантовими числами, що відповідають повному набору спостережуваних і мають певні значення. Оператори цих величин, що називаються інваріантами, коммутують як з гамільтоніаном системи, так і між собою. Як відзначалося, для виразів (7) такими числами є власні значення оператора $\hat{\mathbf{p}}$, або компоненти вектора $\mathbf{k}$.

Що стосується спінового числа, то в однорідному просторі є декілька спінових інваріантів [9], які мають спільну з гамільтоніаном систему власних функцій (7). Підстановка (7) в рівняння на власні значення інваріанта приводить до рівнянь

$$\mathbf{u}_\nu(\mathbf{k})\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\nu,\mathbf{k},\sigma} = \sigma u_\nu(\mathbf{k})\,\chi_{\nu,\mathbf{k},\sigma},\ u_\nu(\mathbf{k}) = |\mathbf{u}_\nu(\mathbf{k})|, \tag{10}$$

що визначають для нього як пару ортогональних спінорів, так і систему координат, в якій вони мають найпростіший вигляд: $\chi_\uparrow = (1\,0)^T$, $\chi_\downarrow = (0\,1)^T$. Тут індекси набувають відповідних значень $\nu = e, p$ та $\sigma = \pm 1$.

Матриці $\mathbf{u}_\nu(\mathbf{k})\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ стають при цьому незалежними інваріантами для частинок ($\nu = e$) і античастинок[2] ($\nu = p$), а рівняння (10) тим самим надає смисл числу $\sigma = \pm 1$ в операторах $a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$ та $a_{\mathbf{k},\sigma}$ в (9), вказуючи, що їхня дія приводить до народження або знищення частинки з *певним* значенням спінового інваріанта при заданому $\mathbf{u}_\nu(\mathbf{k})$. Кожному інваріанту відповідають свої вектори $\mathbf{u}_\nu(\mathbf{k})$ з характерною залежністю від $\mathbf{k}$, врахування якої є обов'язковим. Відзначимо, що сам оператор спіну не є інтегралом руху навіть в однорідному просторі, і тому в станах з заданою енергією можна говорити про спін лише як середнє значення відповідного оператора.

[2] У загальному випадку вектори $\mathbf{u}_e(\mathbf{k})$ та $\mathbf{u}_p(\mathbf{k})$ не співпадають.

Оскільки спінові інваріанти не комутують один з одним, стаціонарному спіновому стану може відповідати певне значення лише одного з них. Наявність кількох інваріантів приводить до неоднозначного вибору спінового стану та є фактично причиною довільності спінорів в (7).

Важливим фактом є також те, що *a priori* спіновий стан не визначено і у загальному випадку інваріантом може вибиратися довільна лінійна комбінація всіх інваріантів, коефіцієнти якої є вільними параметрами. Явний вигляд векторів $\mathbf{u}_e(\mathbf{k})$ і $\mathbf{u}_p(\mathbf{k})$ наведено в [10], де показано, що вони дійсно містять вільні параметри, або компоненти векторів $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}} \equiv \mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{k})$ та $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}} \equiv \mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}(\mathbf{k})$. Індекси останніх пов'язані з позначеннями вихідних інваріантів $\boldsymbol{\mu}$ – вектора *магнітної спінової полярізації* та $\boldsymbol{\mathcal{S}}$ – вектора *спінової полярізації* [9], лінійна комбінація яких $\hat{\mathcal{I}}_{\text{gen}} = \mathbf{r}_{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{k})\,\hat{\boldsymbol{\mu}} + \mathbf{r}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}(\mathbf{k})\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}$ є інваріантом загального вигляду. У координатному просторі $\mathbf{k} \to (1/\hbar)\hat{\mathbf{p}}$, а вектори $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}$ та $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}$ стають операторами, які комутують з гамільтоніаном та з інваріантами просторового руху. Вибір $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}$ та $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}$ з явною залежністю від $\hat{\mathbf{p}}$ відповідає тому чи іншому інваріанту. Наприклад, при $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}} = \hat{\mathbf{p}}$ та $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}} = 0$ маємо оператор *спіральності*, а при $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}} = 0$ та $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}} = \mathbf{e}_j \times \hat{\mathbf{p}}$ – відповідну компоненту вектора *електричної спінової поляризації*.

3. Спін-орбітальна взаємодія

Вирази (7), в яких спінори задаються рівнянням (10) з векторами $\mathbf{u}_e(\mathbf{k})$ і $\mathbf{u}_p(\mathbf{k})$, визначають явний вигляд біспінорів $\Psi^{(0)}_{e,\sigma}(\mathbf{k})$ розкладу (9). Підстановка (9) в (1) приводить до гамільтоніана спінорного поля Дірака у представленні чисел заповнення вільних частинок

$$\begin{aligned}\mathrm{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma}\Bigg(&\varepsilon(\mathbf{k})a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k},\sigma} + \\ &+\frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'}V^{(e-e)}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\,a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k}',\sigma'}\Bigg) + \\ &+\sum_{\mathbf{k},\sigma}\Bigg(-\varepsilon(\mathbf{k})b_{-\mathbf{k},\sigma}b^\dagger_{-\mathbf{k},\sigma} + \\ &+\frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{q},\sigma'}V^{(p-p)}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\,b_{-\mathbf{k},\sigma}b^\dagger_{-\mathbf{k}',\sigma'}\Bigg) + \\ &+\frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'}\Bigg(V^{(e-p)}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\,a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}b^\dagger_{-\mathbf{k}',\sigma'} + \\ &+V^{(p-e)}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\,b_{-\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k}',\sigma'}\Bigg),\end{aligned} \tag{11}$$

де

$$\begin{aligned}V^{(\nu-\nu')}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \left(\Psi^{(0)}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})\right)^\dagger \times \\ \times\left(V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\hat{I} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\hat{\boldsymbol{\alpha}}\right)\Psi^{(0)}_{\nu',\sigma'}(\mathbf{k}')\end{aligned} \tag{12}$$

– матриці розсіювання частинка-частинка ($\nu = \nu' = e$), античастинка-античастинка ($\nu = \nu' = p$) та частинка-античастинка ($\nu \neq \nu'$), які містять фур'є-зображення скалярного $V(\mathbf{r})$ та векторного $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ потенціалів, $V(\mathbf{q})$ та $\mathbf{A}(\mathbf{q})$, відповідно. Тоді оператор (11) набирає виразу суми $\mathrm{H} = \mathrm{H}_e + \mathrm{H}_p + \mathrm{V}_{e-p}$ гамільтоніанів частинок H_e, античастинок H_p та оператора V_{e-p} їх прямого взаємоперетворення. Після приведення добутку операторів народження та знищення до нормального вигляду гамільтоніан (11) стає додатньо визначеним за винятком безмежної адитивної сталої, або енергії стану без будь-яких частинок ("вакууму") – саме від цього значення відраховуються енергії всіх елементарних збуджень.

Стан системи з заданим їхнім числом описується кет-вектором $|\psi\rangle$, який задовольняє РШ:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \mathrm{H}|\psi(t)\rangle,$$

де у відповідності до розглядуваної задачі та законів збереження стан $|\psi\rangle$ породжується добутками потрібного числа операторів народження частинок та античастинок, які діють на вакуумний стан $|0\rangle$. В однорідному ізотропному просторі гамільтоніан (11) має не лише діагональний вигляд і є сумою гамільтоніанів вільних частинок та античастинок, а й розділяє їх гамільтоніани для частинок з протилежними спінами. Як видно, за присутності зовнішніх полів, по-перше, незалежність станів вільних частинок та античастинок зникає; по-друге, матричні елементи розсіювання (12) не лише породжуються скалярним та векторним потенціалами, а також залежать від вигляду спінорів $\chi_{\nu,\mathbf{k},\sigma}$ в амплітудах (7). Явна залежність спінорів (10) від хвильового вектора безпосередньо вказує на зв'язок спінових та просторових ступенів вільності частинок, для опису якого введено поняття, яке отримало назву СОВ. Підкреслимо, що, таким чином, СОВ є не що інше, як безпосередній результат наявності того чи іншого зовнішнього потенціалу, який порушує рівномірний прямолінійний рух частинок.

Нижче обмежимося аналізом випадку відсутності магнітного поля, поклавши в (12) $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$. Як показано в [10], для нерелятивістських потенціалів, коли має місце нерівність $|V(\mathbf{r})|/mc^2 \ll 1$, розділ станів частинок та античастинок можна наближено здійснити з заданою точністю методом канонічного перетворення Шріффера–Вольфа. У більшості задач фізики нерелятивістською величиною є і кінетична енергія, коли має місце друга нерівність, $\hbar k/mc \ll 1$, що дозволяє розкладати енергії (8) та згортки біспінорів у гамільтоніані (11) вже за цим малим параметром. Наближене перенормування за обома цими параметрами дозволяє перейти в гамільтоніані (11) до нерелятивістського наближення та представити його у вигляді $\mathrm{H} = \tilde{\mathrm{H}}_e + \tilde{\mathrm{H}}_p$, де складові $\tilde{\mathrm{H}}_\nu$ описують вже незалежні (квазі)частинки та (квазі)античастинки, що несуть в собі малу (з точністю до другого порядку) "домішку" вихідних станів як частинок, так і античастинок.

Далі розглядатиметься тільки гамільтоніан електронів, тому індекс "e" буде опущено. Розгляд випадку античастинок фактично тотожний розглядуваному. Так, в роботі [10], вважаючи, що обидва параметри є величинами одного порядку, отримано нерелятивістське наближення гамільтоніана (11) з точністю до поправок другого порядку. Таким чином було показано, що нерелятивістський гамільтоніан $\tilde{\mathrm{H}}_e$ електронів у зовнішньому скалярному потенціалі має вигляд

$$\tilde{\mathrm{H}}_e \equiv \mathrm{H} \simeq \sum_{\mathbf{k},\sigma}\left(\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\left(1-\lambda_{\mathrm{SO}}k^2\right)a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k},\sigma} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'} V_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\, a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k}',\sigma'}\right), \tag{13}$$

в якому

$$V_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\chi^\dagger_\sigma \times$$
$$\times\left(1 - \frac{\lambda_{\mathrm{SO}}}{2}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2 + i\lambda_{\mathrm{SO}}\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)\chi_{\sigma'}, \tag{14}$$

причому параметр

$$\lambda_{\mathrm{SO}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \tag{15}$$

характеризує порядок релятивістських поправок і задає величину СОВ.

Гамільтоніан (13) містить усі релятивістські поправки другого порядку як до кінетичної, так і потенціальної енергій. Другий доданок перенормованого розсіювання (14) відомий як поправка Дарвіна, а матриця $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ є релятивістською поправкою, що отримала назву оператора СОВ. В останньому операторі вектор $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ описується виразом

$$\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \mathbf{k}\times\mathbf{k}' + \boldsymbol{\Lambda}_{\mathrm{BEL}}(\mathbf{k},\mathbf{k}'), \tag{16}$$

в якому доданок $\mathbf{k}\times\mathbf{k}'$ відповідає поправці Томаса–Френкеля (див., наприклад, [1, 2, 8]), а наступний доданок $\boldsymbol{\Lambda}_{\mathrm{BEL}}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$, що задається виразом

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\mathrm{BEL}}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k}) - \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k}'), \tag{17}$$

де вектор

$$\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k}) = \mathbf{e}\times\mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{k}) + \frac{\mathbf{e}\cdot\left[\mathbf{e}_z\times\mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{k})\right]}{1+\mathbf{e}\mathbf{e}_z}\mathbf{e}, \tag{18}$$

був теж отриманий в [10], коли $\mathbf{u}_e(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{u}(\mathbf{k})$ має вигляд

$$\mathbf{u}(\mathbf{k}) \simeq \mathbf{u}^{(0)} + 2\lambda_{\mathrm{SO}}\mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{k}) + \ldots. \tag{19}$$

В останньому розкладі через $\mathbf{u}^{(0)}$ та $\mathbf{u}^{(2)}$ позначено члени нульового та другого порядків, відповідно:

$$\mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}} + \mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}},$$
$$\mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{k}) = (\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}\cdot\mathbf{k})\,\mathbf{k} - [\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}\times\mathbf{k}]\times\mathbf{k}.$$

З їх урахуванням розв'язок рівняння (10) може бути записано як

$$\chi_{\mathbf{k},\sigma} \simeq \chi_\sigma + \lambda_{\mathrm{SO}}\chi^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma} = \left(1 - i\lambda_{\mathrm{SO}}\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k})\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)\chi_\sigma,$$

де $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k})$ задається виразом (18), а χ_σ задовольняє спінорне рівняння

$$\mathbf{u}^{(0)}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_\sigma = \sigma u^{(0)}\chi_\sigma, \quad \sigma = \pm 1. \tag{20}$$

Направляючі косинуси γ_j ($\sum_j \gamma_j^2 = 1$) вектора $\mathbf{u}^{(0)}$ відносно осей вибраної системи координат є спіновими змінними. Наприклад, у лабораторній системі $j = x, y, z$ розв'язком (20), як легко переконатися, є спінори

$$\chi_\sigma \equiv \chi_\sigma(\theta,\phi) = e^{i\sigma\phi/2}\begin{pmatrix}\sigma\sqrt{\dfrac{1+\sigma\gamma_z}{2}}\,e^{-i\phi/2}\\ \sqrt{\dfrac{1-\sigma\gamma_z}{2}}\,e^{i\phi/2}\end{pmatrix}, \tag{21}$$

$$\tan\phi = \frac{\gamma_y}{\gamma_x}, \quad \gamma_z = \cos\theta.$$

При цьому у виразі (18) використано одиничний вектор $\mathbf{e} = \mathbf{u}^{(0)}/u^{(0)}$, який можна записати у параметричній формі (через спінові змінні – аргументи спінорів (21)) у вигляді

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp) = \sin\theta\cos\phi\mathbf{e}_x + \sin\theta\sin\phi\mathbf{e}_y + \cos\theta\mathbf{e}_z. \tag{22}$$

З урахуванням виразу (18) вектор $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$, що характеризує СОВ у нерелятивістському гамільтоніані, може бути записано в формі

$$\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \mathbf{k}\times\mathbf{k}' + \mathbf{e}\times\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}') + \frac{\mathbf{e}\cdot[\mathbf{e}_z\times\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}')]}{1+\mathbf{e}\mathbf{e}_z}\mathbf{e}, \tag{23}$$

де $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{k}) - \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{k}')$, а вектор $\mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{k})$ визначено у (19).

Зазначимо, що оператори $a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$ $(a_{\mathbf{k}',\sigma})$ в (13) пов'язані зі спінорами χ_σ, що задовольняють рівності (20), та описують народження (знищення) електронів зі спіновою поляризацією, яка задається вектором $\mathbf{u}^{(0)}$ (19). У підсумку, вектор $\mathbf{e}$, що входить до виразу (23), окрім залежності від просторових змінних, вносить в оператор СОВ ще й явну залежність від спінових ступенів вільності. У зовнішньому потенціалі стаціонарні стани електрона будуть реалізуватися лише при відомому спіновому інваріанті, яким у нерелятивістському наближенні є матриця $\mathbf{u}^{(0)}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Відповідно до симетрії заданого потенціалу такому спіновому інваріанту відповідають вектори $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}$ та $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}$ з конкретною залежністю від $\mathbf{k}$ (а в координатному представленні – від імпульсу), яка потребує визначення.

4. Діагоналізація гамільтоніана з урахуванням спін-орбітальної взаємодії

Як відомо, релятивістські ефекти в задачах нерелятивістської фізики враховуються додаванням до звичайного гамільтоніана Шредінгера лише релятивістського оператора СОВ, який описує явища, що залежать від спіну. З огляду на це запишемо гамільтоніан (13) з урахуванням (14) та (23) у вигляді

$$\mathrm{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma}\Bigg(\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{k}'}V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k}',\sigma} + i\frac{1}{L^3}\lambda_{\mathrm{SO}}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'}V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\times \chi^\dagger_\sigma\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\sigma'}a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k}',\sigma'}\Bigg). \tag{24}$$

Якщо мати на увазі власні стани $|\psi(t)\rangle = \exp(-i\mathcal{E}t/\hbar)\,|\psi\rangle$ електронів у заданому потенціалі, то розв'язок РШ $\mathrm{H}|\psi\rangle = \mathcal{E}|\psi\rangle$ зводиться до діагоналізації гамільтоніана унітарним перетворенням

$$a_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\{n\}}\psi_{\{n\},\sigma}(\mathbf{k})\,a_{\{n\},\sigma}, \tag{25}$$

коефіцієнти якого $\psi_{\{n\},\sigma}(\mathbf{k})$ визначаються рівнянням на власні значення та задовольняють умову ортонормування

$$\sum_{\mathbf{k}}\psi^*_{\{n\},\sigma}(\mathbf{k})\,\psi_{\{n'\},\sigma}(\mathbf{k}) = \delta_{\{n\},\{n'\}}.$$

Ці коефіцієнти задаються набором всіх квантових чисел $\{n\}$, які визначають енергії $E_{\{n\},\sigma}$, тобто рівнянням

$$\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\psi_\sigma(\mathbf{k}) + \frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{k}'}V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\psi_\sigma(\mathbf{k}') + i\lambda_{\mathrm{SO}}\frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'}V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\chi^\dagger_\sigma\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\times \hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\sigma'}\psi_{\sigma'}(\mathbf{k}') = \mathcal{E}\psi_\sigma(\mathbf{k}). \tag{26}$$

Для розв'язку рівняння (26) зручно перейти до координатного представлення

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\psi_\sigma(\mathbf{k}). \tag{27}$$

Тоді у доданках, що містять $V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$, в яких береться подвійна сума по $\mathbf{k}$ та $\mathbf{k}'$, треба провести заміну $\mathbf{k} = \mathbf{k}'+\mathbf{q}$, яка приведе до рівності (див. (23)):

$$\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \equiv \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{q},\mathbf{k}') = (\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}\cdot\mathbf{q})\,\mathbf{k}' + (\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mathcal{S}}}\cdot\mathbf{k}')\,\mathbf{q}\,[\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}\times\mathbf{q}]\times \mathbf{k}' - [\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}\times\mathbf{k}']\times\mathbf{q} + \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{q}),$$

причому $\mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{q})$ визначено в (19). У підсумку рівняння (26) у координатному представленні перетворюється на систему РШ для спінових станів

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}+V(\mathbf{r})\right)\psi_\sigma(\mathbf{r})+i\lambda_{\mathrm{SO}}\times$$
$$\times\sum_{\sigma'}\chi^\dagger_\sigma\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}},\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\sigma'}\psi_{\sigma'}(\mathbf{r})=\mathcal{E}\psi_\sigma(\mathbf{r}). \qquad (28)$$

$$\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}},\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))=-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times\hat{\mathbf{p}}+\mathbf{e}\times$$
$$\times\boldsymbol{\lambda}(\hat{\mathbf{p}},\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))-\frac{[\mathbf{e}\times\boldsymbol{\lambda}(\hat{\mathbf{p}},\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))]\,\mathbf{e}_z}{1+\mathbf{e}\mathbf{e}_z}\mathbf{e}. \qquad (29)$$

В останньому виразі введені позначення

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{\lambda}(\hat{\mathbf{p}},\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))=-\frac{i}{\hbar}\hat{\boldsymbol{\lambda}}-\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})),\\&\hat{\boldsymbol{\lambda}}=(\mathbf{u}_{\mathcal{S}}\cdot\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))\,\hat{\mathbf{p}}+\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\,(\mathbf{u}_{\mathcal{S}}\cdot\hat{\mathbf{p}})+\\&+[\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}]\times\hat{\mathbf{p}}+\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times[\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}\times\hat{\mathbf{p}}],\\&\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))=\boldsymbol{\nabla}(\mathbf{u}_{\mathcal{S}}\cdot\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))+\\&+\boldsymbol{\nabla}\times[\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}\times\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})].\end{aligned} \qquad (30)$$

Перетворення (25) з коефіцієнтами, визначеними рівнянням (28), приводить гамільтоніан (24) до діагонального вигляду за просторовими ступенями вільності, а діагоналізація за спіновим числом означає знаходження спінорів $\chi_\sigma(\theta,\phi)$, для яких $\chi^\dagger_\sigma\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\sigma'}\sim\delta_{\sigma,\sigma'}$. Ця умова виконується, коли спінори χ_σ, які за визначенням (20) є власними для матриці $\mathbf{e}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, будуть такими ж і для матриці $\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Це можливо, коли ці незалежні матриці комутують, а саме:

$$[\mathbf{e}\hat{\boldsymbol{\sigma}},\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}]=\mathbf{e}\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})-\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})\,\mathbf{e}+$$
$$+i\,(\mathbf{e}\times\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})-\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})\times\mathbf{e})\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}=0. \qquad (31)$$

Видно, що рівність (31) вимагає комутації векторів $\mathbf{e}$ та $\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})$. Згідно з (30), вектор $\boldsymbol{\lambda}(\hat{\mathbf{p}})$ має доданок $\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))$, що залежить від координат і, отже, такий же доданок містить і вектор СОВ (29). Тому умова комутації векторного оператора $\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})$ та одиничного вектора $\mathbf{e}$, який у загальному випадку в координатному представленні є також оператором, що містить $\hat{\mathbf{p}}$, виконується за відсутності в $\boldsymbol{\lambda}(\hat{\mathbf{p}})$ вектора, що залежить від просторових координат, що, в свою чергу, задає умову

$$\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))=\boldsymbol{\nabla}(\mathbf{u}_{\mathcal{S}}\cdot\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r}))+$$
$$+\boldsymbol{\nabla}\times[\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}\times\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})]=0.$$

Остання рівність накладає обмеження на вектори $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}$ та $\mathbf{u}_{\mathcal{S}}$ і може бути виконана лише тоді, коли

$$\mathbf{r}_{\mathcal{S}}\cdot\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})=0,\quad \mathbf{r}_{\boldsymbol{\mu}}\times\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})=0, \qquad (32)$$

що є, по суті, рівняннями для векторів $\mathbf{r}_{\boldsymbol{\mu}}$ та $\mathbf{r}_{\mathcal{S}}$, а їх розв'язки залежать від конкретної симетрії поля, що відображається в його градієнті $\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})$.

У зв'язку з тим, що вектор градієнта направлений по нормалі до еквіпотенціальної поверхні у даній точці, має місце рівність $\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})=|\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})|\mathbf{n}$, де $\mathbf{n}$ – одиничний вектор нормалі. Тоді у кожній точці M простору можна використовувати ортогональний базис $\mathbf{e}_1(M)$, $\mathbf{e}_2(M)$, $\mathbf{n}(M)$, де $\mathbf{e}_1(M)$ та $\mathbf{e}_2(M)$ – два ортогональних одиничних вектора, що лежать в площині, дотичній до еквіпотенціальної поверхні у точці M, та такі, що $\mathbf{e}_1(M)\times\mathbf{e}_2(M)=\mathbf{n}(M)$. При цьому довільний вектор $\mathbf{a}$ можна представити у вигляді розкладу $\mathbf{a}=\alpha_1\mathbf{e}_1(M)+\alpha_2\mathbf{e}_2(M)+\alpha_3\mathbf{n}(M)$, який є ні чим іншим, як записом цього вектора у криволінійній системі координат, що пов'язана з потенціалом $V(\mathbf{r})$. Відповідно до умови (32) у такій системі координат

$$\mathbf{u}_{\mathcal{S}}=\alpha_1\mathbf{e}_1(M)+\alpha_2\mathbf{e}_2(M),\quad \mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}=\alpha_3\mathbf{n}(M) \qquad (33)$$

і, отже, $\mathbf{e}=\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}+\mathbf{u}_{\mathcal{S}}=\alpha_1\mathbf{e}_1(M)+\alpha_2\mathbf{e}_2(M)+\alpha_3\mathbf{n}(M)$, де $\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2=1$.

Через накладену умову у виразі (29) фігурує рівність $\boldsymbol{\lambda}(\hat{\mathbf{p}},\boldsymbol{\nabla}V)=-(i/\hbar)\hat{\boldsymbol{\lambda}}$, де відповідно до (30)

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}}=\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{u}_{\mathcal{S}}\cdot\hat{\mathbf{p}})+\boldsymbol{\nabla}V\times[\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}\times\hat{\mathbf{p}}]=$$
$$=|\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})|\big\{\mathbf{n}(M)(\mathbf{u}_{\mathcal{S}}\cdot\hat{\mathbf{p}})+$$
$$+\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{n}(M)\cdot\hat{\mathbf{p}})-\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{n}(M)\cdot\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}})\big\}.$$

Використовуючи тепер визначення (33) та правила векторного обчислення, знаходимо

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}}=|\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})|\,\mathbf{e}\times(\mathbf{n}(M)\times\hat{\mathbf{p}})=\mathbf{e}\times(\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times\hat{\mathbf{p}}).$$

З урахуванням останнього співвідношення та рівності $\mathbf{e}^2=1$ вектор (29), що характеризує СОВ в рівняннях (28), набуває форми

$$\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}},\boldsymbol{\nabla}V)=-\frac{i}{\hbar}\frac{(\mathbf{e}+\mathbf{e}_z)\cdot\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times\hat{\mathbf{p}}}{1+\mathbf{e}\mathbf{e}_z}\mathbf{e}. \qquad (34)$$

Таким чином, при векторах $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\mu}}$ та $\mathbf{u}_{\mathcal{S}}$, що задовольняють співвідношення (32), умова (31) виконується автоматично і матричний елемент $\chi_\sigma^\dagger \mathbf{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\sigma'} \sim \delta_{\sigma,\sigma'}$. Прямим наслідком цього є розділення РШ (28) на незалежні для кожного спінового стану рівняння

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \sigma\frac{\lambda_{\mathrm{SO}}}{\hbar}\frac{(\mathbf{e}+\mathbf{e}_z)\cdot\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times\hat{\mathbf{p}}}{1+\mathbf{e}\mathbf{e}_z}\right)\times \times\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\psi_\sigma(\mathbf{r}), \tag{35}$$

розв'язки яких $\psi_{\{n\},\sigma}(\mathbf{r})$ з відповідними власними значеннями $E_{\{n\},\sigma}$ визначають коефіцієнти перетворення (25)

$$\psi_{\{n\},\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{L^{3/2}}\int e^{-i\mathbf{kr}}\psi_{\{n\},\sigma}(\mathbf{r})d\mathbf{r},$$

а гамільтоніан (24) повністю діагоналізується

$$\mathrm{H} = \sum_{\{n\},\sigma}\mathcal{E}_{\{n\},\sigma}a^\dagger_{\{n\},\sigma}a_{\{n\},\sigma}. \tag{36}$$

Беручи до уваги явний вигляд спінорів (21) та вводячи спінорні функції

$$\sum_\sigma \chi_\sigma\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\psi_+ - e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\psi_- \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\psi_+ + \cos\frac{\theta}{2}\psi_-\end{pmatrix} = = \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix}\psi_\uparrow(\mathbf{r}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{r})\end{pmatrix},$$

систему рівнянь (28) або (35) можна записати у вигляді єдиного стаціонарного рівняння Паулі $\hat{H}_{\mathrm{P}}\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})$ з гамільтоніаном $\hat{H}_{\mathrm{P}} = H_0 + \mathrm{V}_{\mathrm{SO}}$, де

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \tag{37}$$
$$\mathrm{V}_{\mathrm{SO}} = \frac{\lambda_{\mathrm{SO}}}{\hbar}\frac{(\hat{\mathbf{e}}+\mathbf{e}_z)\cdot[\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times\hat{\mathbf{p}}]}{1+\hat{\mathbf{e}}\mathbf{e}_z}\hat{\mathbf{e}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}.$$

При цьому вектор $\hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{u}}^{(0)}/u^{(0)}$, що входить до оператора СОВ та за означенням характеризує спіновий інваріант, має бути узгодженим з умовою комутації матриці $\hat{\mathbf{u}}^{(0)}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ з гамільтоніаном. Із цієї умови випливає природна вимога

$$\left[\hat{\mathbf{u}}^{(0)}, H_0\right] = 0. \tag{38}$$

Іншими словами, векторний оператор $\hat{\mathbf{u}}^{(0)}$, що визначає оператор узагальненої СОВ V_{SO}, має бути інваріантом (або функцією інваріантів) просторового руху в заданому потенціалі $V(\mathbf{r})$. Кожному конкретному потенціалу при цьому відповідає "свій" інваріант (у загальному випадку не єдиний) і, отже, умова (38) задає явний вигляд $\hat{\mathbf{u}}^{(0)}$, а значить і форму узагальненого оператора СОВ, який містить у цьому потенціалі не лише поправку Томаса–Френкеля.

Для ілюстрації розглянемо далі модельний потенціал у вигляді КЯ, в якому зв'язаним станам відповідають електрони, що захоплені ямою та вільно пересуваються в її площині (2D електрони).

5. Вільні 2D електрони

Дослідимо стани електронів у потенціалі КЯ, що описуються рівнянням (35). Обираючи вісь z у напрямку зміни потенціалу, $V(\mathbf{r}) = V(z)$, представимо оператор імпульсу у вигляді $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}_\perp + \hat{p}_z\mathbf{e}_z$, де $\hat{\mathbf{p}}_\perp = \hat{p}_x\mathbf{e}_x + \hat{p}_y\mathbf{e}_y$. У цьому випадку $\boldsymbol{\nabla}V(z) = \mathbf{e}_z dV(z)/dz \equiv V'(z)\mathbf{e}_z$, а рівняння (35) набуває виразу

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(z) + \sigma\frac{\lambda_{\mathrm{SO}}}{\hbar}V'(z)\frac{\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{e}_z\times\hat{\mathbf{p}}}{1+\hat{\mathbf{e}}\mathbf{e}_z}\right)\times \times\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\psi_\sigma(\mathbf{r}).$$

Легко переконатися, що вибраний потенціал залишає інтегралами руху дві компоненти імпульсу $\hat{p}_x$ та $\hat{p}_y$. При цьому стани електронів, захоплених КЯ, будуть характеризуватися певним значенням імпульсу $\hat{\mathbf{p}}_\perp$ та описуватимуться нормованою хвильовою функцією

$$\begin{aligned}&\psi_{\mathbf{k}_\perp}(\mathbf{r}) = L^{-1}e^{i\mathbf{k}_\perp\mathbf{r}_\perp}\varphi_{\mathbf{k}_\perp}(z),\\ &\mathbf{r}_\perp = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y,\\ &\mathbf{k}_\perp = k_x\mathbf{e}_x + k_y\mathbf{e}_y.\end{aligned} \tag{39}$$

За умовою (38) вектор $\hat{\mathbf{e}}$ може залежати лише від $\hat{\mathbf{p}}_\perp$. Після підстановки виразу (39) в (35), отримаємо стаціонарне одновимірне РШ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}_\perp^2}{2m} + V(z) + + \sigma\lambda_{\mathrm{SO}}\frac{\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)\cdot\mathbf{e}_z\times\mathbf{k}_\perp}{1+\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)\mathbf{e}_z}V'(z)\right)\times \times\varphi_{\mathbf{k}_\perp,\sigma}(z) = \mathcal{E}\varphi_{\mathbf{k}_\perp,\sigma}(z), \tag{40}$$

в якому четвертий доданок у дужках лівої частини задає узагальнену СОВ. Це рівняння співпадає з рівнянням, отриманим у роботах [6,11] при пошуку аналітичного загального розв'язку РД для даної задачі, та рівнянням, отриманим у роботі [10] на основі нерелятивістського гамільтоніана (24).

На вектор $\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)$, що визначає спіновий стан електрона, додаткові умови не накладаються, і він може вибиратися з довільною залежністю від $\mathbf{k}_\perp$. Це означає, що вільні 2D електрони все ще зберігають певну спінову свободу, тобто їх стан залишається спіново невизначеним.

Останній доданок у лівій частині рівняння (40) характеризує вплив – через механізм СОВ – країв КЯ на динаміку електронів у залежності від їх спінового стану. Запишемо $\mathbf{k}_\perp = k_\perp \mathbf{e}_{k_\perp}$, де

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}_\perp} = \frac{\mathbf{k}_\perp}{k_\perp} = \mathbf{e}_x \cos\varphi_{\mathbf{k}_\perp} + \mathbf{e}_y \sin\varphi_{\mathbf{k}_\perp}$$

– одиничний вектор, що визначає напрямок руху електронів в площині, та врахуємо (22). Тут

$$\tan\varphi_{\mathbf{k}_\perp} = \frac{k_y}{k_x}, \quad k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}.$$

Це дозволяє отримати вираз

$$\frac{\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)\cdot\mathbf{e}_z \times \mathbf{k}_\perp}{1 + \mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)\cdot\mathbf{e}_z} = k_\perp f(\mathbf{k}_\perp) \tag{41}$$

для коефіцієнта, що визначає величину узагальненої СОВ в рівнянні (40). Тут введена функція

$$f(\mathbf{k}_\perp) \equiv f(\theta, \phi, \varphi_{\mathbf{k}_\perp}) = \frac{\sin\theta \sin(\phi - \varphi_{\mathbf{k}_\perp})}{1 + \cos\theta}.$$

Кути θ та ϕ можуть, взагалі кажучи, залежати від напрямку $\mathbf{k}_\perp$, або $\theta = \theta(\mathbf{k}_\perp)$ та $\phi = \phi(\mathbf{k}_\perp)$.

При розв'язуванні рівняння (40) слід брати до уваги, що гамільтоніан (24) є нерелятивістським наближенням зі збереженням доданків порядку λ_{SO}. Тому і самі розв'язки будуть коректними саме з цією точністю, що дозволяє при розв'язуванні рівняння (40) розглядати доданок $\sim \lambda_{\mathrm{SO}}$ як збурення, використовуючи в ролі нульового наближення розв'язки рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = \mathcal{E}\psi(z). \tag{42}$$

Як відомо, якщо $\psi_n(z)$ та $\mathcal{E}_n$ – власні функції та власні значення рівняння (42), то для дискретного спектра КЯ у першому порядку теорії збурень розв'язки (40) можуть бути легко записані, а саме:

$$\varphi_{\mathbf{k}_\perp,\sigma}(z) = \psi_n(z) + \sigma\lambda_{\mathrm{SO}} k_\perp f(\mathbf{k}_\perp) \sum_{n' \neq n} c_{n,n'}\psi_{n'}(z), \tag{43}$$

$$\mathcal{E}_{n,\sigma}(\mathbf{k}_\perp) = \mathcal{E}_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2m} + \sigma\lambda_{\mathrm{SO}} k_\perp v_{nn} f(\mathbf{k}_\perp). \tag{44}$$

Тут

$$c_{n,n'} = \frac{v_{nn'}^*}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{n'}}, \tag{45}$$

$$v_{n,n'} = \int \psi_n^*(z)\frac{dV(z)}{dz}\psi_{n'}(z)\,dz, \quad v_{n,n'}^* = v_{n',n}.$$

Таким чином, 2D електрони описуються гамільтоніаном (36), який набуває вигляду

$$\mathrm{H}_{2D} = \sum_{n,\mathbf{k}_\perp,\sigma} \mathcal{E}_{n,\sigma}(\mathbf{k}_\perp)\, a^\dagger_{n,\mathbf{k}_\perp,\sigma} a_{n,\mathbf{k}_\perp,\sigma}. \tag{46}$$

Тут оператори $a^\dagger_{n,\mathbf{k}_\perp,\sigma}$ ($a_{n,\mathbf{k}_\perp,\sigma}$) є операторами народження (знищення) "вільних" 2D електронів [3] з хвильовим вектором $\mathbf{k}_\perp$ в 2D зоні $\mathcal{E}_{n,\sigma}(\mathbf{k}_\perp)$, пов'язаній з n-м дискретним рівнем КЯ, а спіновий стан цих електронів визначається вектором $\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)$ (22).

Із виразів (44) та (43) видно, що узагальнена СОВ забезпечує, по-перше, спінове розщеплення (ефект Рашби) 2D зон, а по-друге, що раніше не відзначалося, спінову залежність розподілу густини електронів за товщиною КЯ

$$|\varphi_{\mathbf{k}_\perp,\sigma}(z)|^2 = |\psi_n(z)|^2 + \sigma 2\lambda_{\mathrm{SO}} k_\perp f(\mathbf{k}_\perp) F_n(z),$$

де

$$F_n(z) = \sum_{n' \neq n} \frac{\psi_n(z) w_{n,n'} \psi_{n'}(z)}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{n'}}.$$

Спінове розщеплення 2D зон (44) на величину $2\lambda_{\mathrm{SO}} k_\perp v_{nn} f(\mathbf{k}_\perp)$ відмінне від нуля лише при порушеній інверсній симетрії потенціалу. Множник $v_{nn} \neq 0$ при $V_0(-z) \neq V_0(z)$ характеризує асиметрію КЯ (як можливу внутрішню, так і зумовлену, наприклад, зовнішнім, перпендикулярним до площини xy електричним полем). Просторове розділення густини електронів з різними спінами характеризується функцією $2\lambda_{\mathrm{SO}} k_\perp f(\mathbf{k}_\perp) F_n(z)$, яка скінченна і в симетричній КЯ, коли відсутнє розщеплення Рашби. Це, звичайно, відомо, і ми наводимо ці результати лише як свідчення, що узагальнена СОВ відтворює встановлені і усталені ефекти та дозволяє переконатися, якому спіновому інваріанту має відповідати потенціал, щоб мав місце, наприклад, ефект Рашби.

[3] У даному випадку "вільні" означає, що ці частинки захоплені потенціалом КЯ та вільно рухаються в її площині.

6. Прояв спін-орбітальної взаємодії в 2D системі

Як відомо, зв'язаним станам електронів в КЯ відповідає дискретний невироджений спектр РШ (42) з дійсними власними функціями $\psi_n(z)$, що мають певну парність. При цьому парні та непарні функції чергуються зі зростанням власних енергій. Матричні елементи (45) симетричної відносно початку координат КЯ відмінні від нуля лише між парними та непарними станами. Тому $F_n(-z) = -F_n(z)$, і розподіл ймовірності знаходження електрона з хвильовим вектором $\mathbf{k}_\perp$ та спіновим числом σ виявляється асиметричним зі зміщенням до одного з країв КЯ. При цьому, як легко бачити, електрони з одним і тим же $\mathbf{k}_\perp$, але з протилежними спінами зміщуються до протилежних поверхонь, що безпосередньо вказує на появу в такій ситуації спінового ефекту Холла і по суті є його механізмом.

Водночас спінове розщеплення енергетичних зон та спін-залежний розподіл електронів за товщиною КЯ залежать від форми, яка визначає явний вигляд розв'язків рівняння (40) або (42). Функція $f(\mathbf{k}_\perp)$ при цьому відіграє свою роль, привносячи в ці явища явну залежність від спінового стану електронів. Дійсно, відповідно до (41) аргументами цієї функції є спінові (кути θ та ϕ) та просторові (кут $\varphi_{\mathbf{k}_\perp}$) змінні. Конкретні значення спінових змінних θ та ϕ відповідають певним спіновим інваріантам, що зберігаються в полі $V(z)$. Зокрема, якщо в ролі спінового інваріанта вибрати (i) z-компоненту електричної спінової поляризації ϵ_z, то $\theta = \pi/2$ та $\phi = \pi/2 + \varphi_{\mathbf{k}_\perp}$; якщо ж інваріантом служить (ii) складова псевдовектора спіну $\mathcal{S}_j$ в площині xy, то $\theta = \pi/2$, а $\phi = \mathrm{const}$ і набуває значення в інтервалі $0 \le \phi \le \pi/2$ (значенню $\phi = 0$ відповідає x-компонента інваріанта, а $\phi = \pi/2$ – y-компонента).

Із визначень (41) видно, що вплив отриманої СОВ на динаміку 2D електронів має місце при відмінній від нуля проекції $\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)$ на напрямок одиничного вектора $\mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}_\perp}$ та досягає свого максимуму, коли $\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)$ співпадає з цим вектором (спіновий стан Рашби). Реалізація конкретного спінового стану повинна визначатися заданними умовами (концентрацією носіїв, наявністю електричного і/або магнітного полів, зовнішнім тиском, властивостями конкретного інтерфейсу та інше), а отже, повинна проявлятися в реальних фізичних експериментах.

Як відзначалося в [6], в ізольованій 2D зоні (наприклад, коли вільні електрони заповнюють стани основного $n = 0$ рівня КЯ, який нижче тільки і розглядатиметься) повна енергія N_e електронів

$$E_{\mathrm{tot}} = \sum_{\sigma,\mathbf{k}_\perp} \mathcal{E}_\sigma(\mathbf{k}_\perp)\,\bar{n}_{\sigma\mathbf{k}_\perp}, \qquad \sum_{\sigma,\mathbf{k}_\perp} \bar{n}_{\sigma\mathbf{k}_\perp} = N_e,$$

з рівноважною функцією розподілу

$$\bar{n}_{\sigma,\mathbf{k}} = \frac{1}{\exp\{(\mathcal{E}_{\sigma,\mathbf{k}} - \mu)/k_{\mathrm{B}}T\} + 1} = \bar{n}\,(\mathcal{E}_{\sigma,\mathbf{k}}), \qquad (47)$$

найменшу енергію за відсутності зовнішніх полів при низькій температурі T має стан Рашби (i). Розщеплення Рашби 2D зон та їх спінову поляризацію було експериментально підтверджено для низки матеріалів та структур, в яких носії мають 2D властивості (див., наприклад, огляд [13]).

Просторове розділення за спіном носіїв в КЯ може вплинути на спостережуване локальне значення спіну $\mathbf{S}$, або пов'язаного з ним магнітного моменту $\mathbf{M} = (e/mc)\mathbf{S}$, що характеризує систему 2D електронів. Сам спін у стаціонарних станах не має, як зазначалося, певного значення, оскільки інтегралом руху є лише його абсолютне значення. Тому спостережуване значення спіну задається середнім значенням оператора спіну, який у квантовій теорії поля, як і сам оператор Гамільтона (1), задається виразом:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\int \Psi^\dagger(\mathbf{r})\hat{\mathbf{\Sigma}}\Psi(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad \hat{\mathbf{\Sigma}} = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{pmatrix},$$

де біспінори наведені у (9). На відміну від гамільтоніана в представленні вільних частинок оператор $\mathbf{S}$ не приводиться до діагонального вигляду, а містить доданки, які пов'язують оператори народження та знищення електронів та позитронів з різними спіновими числами. Але при розрахунку середнього значення $\langle \mathbf{S} \rangle = \mathrm{Sp}\,(\hat{\rho}_e \mathbf{S})$ зі статистичним оператором $\hat{\rho}_e$ для системи електронів, що описуються гамільтоніаном (46), недіагональні доданки зануляються і в нерелятивістському наближенні для густини спіну $\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle / L^2$ в КЯ отримуємо такий вираз [4]:

$$\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle = \int \langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle dz,$$

[4] Більш точно, у нерелятивістському наближенні зі збереженням величин порядку λ_{SO} матрицю Паулі в цьо-

де

$$\langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle = \frac{\hbar}{2L^2} \sum_{\mathbf{k}_\perp, \sigma} \chi_\sigma^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi_\sigma |\varphi_{\mathbf{k}_\perp, \sigma}(z)|^2 \bar{n}_{\sigma, \mathbf{k}_\perp}.$$

Тут $\bar{n}_{\sigma,\mathbf{k}_\perp} = \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}_e a^\dagger_{\sigma,\mathbf{k}_\perp} a_{\sigma,\mathbf{k}_\perp}\right)$ – функція розподілу електронів, а спінори χ_σ задані виразами (21).

Використовуючи тепер явний вигляд спінорів, знаходимо

$$\chi_\sigma^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi_\sigma = \sigma(\sin\theta\cos\phi\mathbf{e}_x + \sin\theta\sin\phi\mathbf{e}_y +$$

$$+ \cos\theta\mathbf{e}_z) = \sigma\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp),$$

а після заміни підсумовування за квазінеперервним значенням $\mathbf{k}_\perp$ інтегруванням приходимо до такого виразу для середнього локального значення густини вектора спіну електронів в ізольованій 2D зоні:

$$\langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle = \frac{\hbar}{8\pi^2} \int dk_x dk_y \sum_\sigma \sigma \mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp) |\varphi_{\sigma,\mathbf{k}_\perp}(z)|^2 \bar{n}_{\sigma,\mathbf{k}_\perp}.$$

У симетричній КЯ ($v_{n,n} = 0$) спінове розщеплення зон відсутнє і функція розподілу $\bar{n}_{\mathbf{k}_\perp}$ не залежить від спінового числа. З урахуванням цього після підсумовування за спіновим індексом та підстановки явного виразу $|\varphi_{\sigma,\mathbf{k}_\perp}(z)|^2$ знаходимо

$$\langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle =$$

$$\frac{\hbar}{2\pi^2} \lambda_{\mathrm{SO}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{k}_\perp} \int_0^\infty dk_\perp \mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp) k_\perp^2 f(\mathbf{k}_\perp) \bar{n}_{\mathbf{k}_\perp} F(z).$$

Видно, що середнє значення $\langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle$ залежить від заданого спінового стану електронів, яке визначає конкретні значення кутів θ та ϕ у виразах (22) та (41). У рівноважному 2D електронному газі з функцією розподілу (47), $\bar{n}_{\mathbf{k}_\perp} = \bar{n}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_\perp})$, спіни електронів для вибраних вище станів (i) та (ii) компенсуються по всій товщині КЯ $\langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle = 0$. За наявності ж у системі струму, зумовленого зовнішнім електричним полем, ситуація змінюється кардинально. Зовнішнє поле, вектор напруженості якого лежить у площині КЯ, збурює електронну систему, що зумовлює зміну функції розподілу. У лінійному за збуренням наближенні ця функція може бути представлена сумою [12]:

$$\bar{n}_{\mathbf{k}}^{\mathrm{pert}} = \bar{n}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}) + \Delta n_{\mathbf{k}},$$

у якій зумовлена полем поправка

$$\Delta n_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar\tau e}{m} \mathbf{E} \cdot \mathbf{k} \left(-\frac{\partial \bar{n}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}})}{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}} \right) \tag{48}$$

містить феноменологічний час релаксації τ.

Вибираючи вісь x вздовж напрямку поля, приходимо до такого виразу для локальної спінової поляризації носіїв, спричиненої спільною дією СОВ та електричного струму в КЯ:

$$\langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle = \frac{\hbar^2 \tau e E}{2\pi^2 m} \lambda_{\mathrm{SO}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{k}_\perp} \times$$

$$\times \int_0^\infty dk_\perp \mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp) k_\perp^3 f(\mathbf{k}_\perp) \times$$

$$\times \cos\varphi_{\mathbf{k}_\perp} \left(-\frac{\partial \bar{n}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}})}{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}} \right) F(z).$$

Внаслідок того, що як одиничний вектор $\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp)$, так і функція $f(\mathbf{k}_\perp)$ можуть залежати лише від кута $\varphi_{\mathbf{k}_\perp}$, у цьому виразі можна провести інтегрування по $k_\perp$, перетворивши його в інтегрування по енергії та враховуючи, що при низьких температурах $(-\partial\bar{n}(\mathcal{E})/\partial\mathcal{E})$ веде себе як δ-функція від $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{\mathrm{F}})$, де $\mathcal{E}_{\mathrm{F}}$ – енергія Фермі. У такий спосіб отримуємо середнє:

$$\langle \hat{\mathbf{s}}(z) \rangle = \frac{\tau e E n_e}{\pi} \lambda_{\mathrm{SO}} F(z) \boldsymbol{\mathcal{I}},$$

де n_e – число електронів на одиницю площі КЯ, $F(z) \equiv F_0(z)$, а вектор

$$\boldsymbol{\mathcal{I}} = \int_0^{2\pi} \mathbf{e}(\theta, \phi) f(\theta, \phi, \varphi_{\mathbf{k}_\perp}) \cos\varphi_{\mathbf{k}_\perp} d\varphi_{\mathbf{k}_\perp}$$

визначається тим, якому спіновому інваріанту відповідають електронні стани, тобто фактично залежить від конкретного вигляду введеного вище загального спінового інваріанту $\hat{\mathcal{I}}_{\mathrm{gen}}$.

Якщо спіновий стан задається інваріантом (i), то вектор $\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp) = -\sin\varphi_{\mathbf{k}_\perp}\mathbf{e}_x + \cos\varphi_{\mathbf{k}_\perp}\mathbf{e}_y$ і $f(\mathbf{k}_\perp) = 1$, звідки знаходимо $\boldsymbol{\mathcal{I}} = \pi\mathbf{e}_y$.

му виразі необхідно замінити матрицею $\hat{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\lambda_{\mathrm{SO}}(\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k}) \times \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}])$. При цьому в напрямку спіну, що визначається суто нерелятивістським виразом, релятивістські поправки дають малий внесок, яким можна знехтувати.

Для спінового стану, що відповідає інваріанту (ii), коли $\mathbf{e}(\mathbf{k}_\perp) = \cos\phi \mathbf{e}_x + \sin\phi \mathbf{e}_y$ і $f(\mathbf{k}_\perp) = \sin(\phi - \varphi_{\mathbf{k}_\perp})$, отримуємо $\boldsymbol{\mathcal{I}} = \pi(\cos\phi \mathbf{e}_x + \sin\phi \mathbf{e}_y)\sin\phi$. Видно, що при $\phi = 0$ вектор $\boldsymbol{\mathcal{I}} = 0$, а при $\phi = \pi/2$ цей вектор $\boldsymbol{\mathcal{I}} = \pi \mathbf{e}_y$.

Відзначимо, що зовнішнє електричне поле, направлене по осі x, понижує симетрію системи, а інваріантом залишається лише y-компонента псевдовектора спіну, $\phi = \pi/2$. Таким чином, локальна спінова поляризація носіїв у КЯ описується формулою:

$$\langle \hat{\mathbf{s}}(z)\rangle = \tau e E n_e \lambda_{\mathrm{SO}} F(z)\mathbf{e}_y,$$

де $F(-z) = -F(z)$ та $F(0) = 0$. Отже, електричний струм у шарі КЯ індукує спінову поляризацію носіїв поблизу граничних поверхонь шару з протилежною поляризацією на протилежних поверхнях, що, як зазначалося, цілком зумовлено дією узагальненої СОВ. Це явище отримало назву спінового ефекту Холла та експериментально спостерігалося у структурах з подібною геометрією, наприклад, [14] (див. огляд [15]). У даному випадку він є наслідком виключно геометричних властивостей досліджуваних 2D структур.

7. Висновки

Таким чином, спираючись на квантову теорію спінорного поля Дірака, в роботі знайдено узагальнений оператор СОВ $\mathrm{V}_{\mathrm{SO}} \sim \boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}}, \boldsymbol{\nabla}V)\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, що задається виразами (37) та (34), який шляхом його використання у нерелятивістському РШ забезпечує послідовний опис впливу СОВ на електрони, що рухаються у зовнішньому потенціалі $V(\mathbf{r})$. Припускається також, що останній теж відповідає певним умовам малості у порівнянні з власною енергією електрона, що, принаймні у задачах фізики твердого тіла, завжди виконується. При цьому вектор $\boldsymbol{\Lambda}(\hat{\mathbf{p}}, \boldsymbol{\nabla}V)$, який, власне, і визначає СОВ, крім загально відомої поправки Томаса–Френкеля, містить ще й додатковий внесок (див. (16)).

Нагадаємо, що поправка Томаса–Френкеля у векторі (16) з'являється внаслідок врахування явної залежності нижнього ("малого") спінора від імпульсу, а от додатковий векторний доданок $\boldsymbol{\Lambda}_{\mathrm{BEL}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ виникає через таку ж залежність поправок порядку Λ_{SO} до верхнього ("великого") спінора в електронній амплітуді (біспінорі), що, наскільки нам відомо, зазвичай ігнорувалося.

Надзвичайно також суттєво, що при знаходженні вектора (16) важливу роль відіграють спінові інваріанти. Деяким з них, наприклад, операторам спіральності та вектора електричної спінової поляризації, а також оператору повного моменту кількості руху $\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{L} + \frac{1}{2}\hbar\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ та комутуючому з ним оператору $\hat{K} = \left(\hat{\mathbf{L}}\hat{\boldsymbol{\Sigma}} + \hbar\right)\hat{\beta}$ (тут $\hat{\mathbf{L}}$ – обертальний момент), відповідають вектори $\mathbf{u}_\nu$ (див. (10)) без релятивістських поправок.

На останок сформулюємо твердження, коли нова, отримана в роботі поправка, що доповнює стандартну і широко використовувану СОВ, не з'являється. Це має місце, якщо симетрія потенціалу зберігає якийсь з названих щойно операторів і для відповідного спінового стану узагальнений оператор СОВ автоматично набуває вигляду поправки Томаса–Френкеля. Коли ж симетрія потенціалу не порушує збереження ще одного, тобто іншого, інваріанта, то такий спіновий стан (або стани) без урахування $\boldsymbol{\Lambda}_{\mathrm{BEL}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ в (16) буде втрачений, про що недвозначно свідчить приклад потенціалу КЯ, в якому поправка Томаса–Френкеля може описати лише спіновий стан з розщепленням Рашби. Але вона, як показано, не є єдино можливою, і наразі можна лише сподіватися, що не тільки доданок Томаса–Френкеля задає усі можливі "спінові" наслідки СОВ і що узагальнене СОВ знайде своє застосування.

Автори вдячні Ю.Б. Гайдідею за обговорення отриманих результатів, зокрема, механізму спінового ефекту Холла. Робота виконувалася в рамках тематики бюджетної програми КРКВК 6541230 та наукової програми 0117U00236 Відділення фізики та астрономії НАН України.

1. Г. Бете. *Квантовая Механiка* (Мир, 1965).
2. О.С. Давидов. *Квантова Механiка* (Видавничий дiм Академперiодика, 2012).
3. L.H. Thomas. The Motion of the spinning electron. *Nature* **117**, 514 (1926).
4. J. Frenkel. Zur Theorie der Elastizitätsgrenze und der festigkeit kristallinischer körper. *Z. Phys.* **37**, 243 (1926).
5. A. Eremko, L. Brizhik, V. Loktev. Spin states of Dirac equation and Rashba spin-orbit interaction. *Ann. Phys.* **361**, 423 (2015).
6. A. Eremko, L. Brizhik, V. Loktev. General solution of the Dirac equation for quasi-two-dimensional electrons. *Ann. Phys.* **369**, 85 (2016).

7. Н.Н. Боголюбов, Д.В. Ширков. *Квантовые поля* (Наука, 1980).
8. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Релятивистская квантовая теория. Часть I* (Наука, 1968).
9. А.А. Соколов, И.М. Тернов. *Релятивистский электрон* (Наука, 1974).
10. A.A. Eremko, L.S. Brizhik, V.M. Loktev. On the theory of the full set of relativistic corrections for Schroedinger equation. *Low Temp. Phys.*. **44**, 6, 734 (2018).
11. А.А. Еремко, В.М. Локтев. К теории собственных спиновых состояний и спин-орбитального взаимодействия квазидвумерных электронов. *ФНТ* **43**, 456 (2017).
12. Дж. Займан. *Принципы теории твердого тела* (Мир, 1966).
13. G. Bihlmayer, J. Rader, K. Winkler. Focus on the Rashba Effect. *New J. Phys.* **17**, 050202 (2015).
14. Y.K. Kato, R.C. Myers, A.C. Gossard, D.D. Awschalom, "Observation of the spin Hall effect in semiconductors". *Science* **306**, 1910 (2004).
15. J. Sinova, S.O. Valenzuela, J. Wunderlich, C.H. Back, T. Jungwirth, "Spin Hall effects". *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1213 (2015).

Одержано 01.02.19

A.A. Eremko, L. Brizhik, V.M. Loktev

GENERALIZED SPIN-ORBIT INTERACTION AND ITS MANIFESTATION IN TWO-DIMENSIONAL ELECTRON SYSTEMS

Р е з ю м е

In frame of Dirac quantum field theory that describes electrons and positrons as elementary excitations of the spinor field, the generalized operator of the spin-orbit interaction is obtained using non-relativistic approximation in the Hamilton operator of the spinor field taking into account the presence of an external potential. This operator is shown to contain a new term in addition to the known ones. By an example of a model potential in the form of a quantum well, it is demonstrated that the Schrödinger equation with the generalized spin-orbit interaction operator describes all spin states obtained directly from the Dirac equation. The dependence of the spin-orbit interaction on the spin states in quasi-two-dimensional systems of electrons localized in a quantum well is analyzed. It is demonstrated that the electric current in the quantum well layer induces the spin polarization of charge carriers near the boundary surfaces of the layer, with the polarization of the charge carriers being opposite at the different surfaces. This phenomenon appears due to the spin-orbit interaction and is known as the spin Hall effect, which was observed experimentally in heterostructures with the corresponding geometry.