

电子的相对论平均场理论与一阶、二阶 Rashba 效应*

胥建卫 王顺金†

(四川大学物理科学与技术学院理论物理中心, 成都 610064)

(2008 年 11 月 10 日收到, 2008 年 12 月 13 日收到修改稿)

用多体平均场意义下电子的 Dirac 方程讨论了电子自旋动力学及其相关问题. 在大分量 Dirac 方程的非相对论展开中讨论了电子自旋动力学的高阶效应, 并且在二维情形下得到了包括一阶和二阶 Rashba 效应的电子自旋动力学哈密顿量, 求出了相应的包括二阶 Rashba 效应的哈密顿量的能量和波函数的本征值解, 由此讨论了二阶 Rashba 效应修正的物理含义和大小.

关键词: 二阶 Rashba 效应, 自旋电子学, Dirac 方程, 相对论平均场理论

PACC: 7110A, 7510D, 1110Q

1. 引 言

近几年, 半导体中电子自旋的控制(自旋电子学)的研究引起了人们的极大关注, 原因是它可能利用电子自旋自由度携带信息而给原有的电子学和半导体技术带来革命, 在未来的量子计算和量子通讯中发挥重要作用. 当前自旋电子学的核心内容是运用电场对电子的自旋进行操控, 其理论基础主要是考虑 Rashba 效应. 这方面的理论和实验研究已经有许多文章发表, 都是基于一阶 Rashba 效应^[1-7]. 随着理论研究的深入和实验研究精度的提高, 对高阶自旋效应的研究, 将是十分有意义的^[8-13]. 例如, Murakami 在关于 Rashba 模型的讨论中, 基于对称性和 Rashba 效应与自旋量子霍尔效应(SHE)的关系而唯象地引入了二阶 Rashba 项^[13]

$$H = \frac{p^2}{2m} + (\lambda_1 + \lambda_2 p^2) \chi (p_2 \sigma_1 - p_1 \sigma_2), \quad (1)$$

而从相对论平均场理论的 Dirac 方程出发, 微观地讨论二阶 Rashba 效应的工作尚未见到.

由于自旋电子学研究固体中电子自旋的输运, 是多体系统中的电子动力学问题, 因此本文将从平均场意义下电子的 Dirac 方程来讨论电子自旋动力学和一阶、二阶 Rashba 效应.

2. 电子的相对论平均场理论^[14]

固体中电子的相对论平均场理论的定态 Dirac 方程为

$$H\psi = E\psi, \quad (2a)$$

相对论平均场哈密顿量

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2\beta + V(\mathbf{x}), \quad (2b)$$

其中 $V(\mathbf{x})$ 为电场(包括外电场和固体平均电场), m 是电子的有效质量,

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (3a)$$

I 是 2 阶单位矩阵, 而

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3b)$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

是 σ_3 本征表象中的 Pauli 矩阵. 动量 $p_i = -i\hbar\partial_i$, $p^2 = -\hbar^2\partial_i\partial_i = -\hbar^2\partial_i^2$, 重复指标表示求和. 利用公式

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon^{ijk}\sigma_k (\epsilon^{ijk} \text{ 是置换符号}), \quad (4)$$

可得后面要用的公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \chi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = p^2, \quad (5a)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) V (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = Vp^2 + (\mathbf{p}V) \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\mathbf{p}V) \times \mathbf{p}]. \quad (5b)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 90503008, 10775100)和兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: sjwang@home.swjtu.edu.cn

3. 相对论自旋效应

在方程(2a)中, 令

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad E = E' + mc^2, \quad (6a)$$

则大小分量的 Dirac 方程为

$$(V - E')\varphi + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi = 0, \quad (6b)$$

$$c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi + (-2mc^2 + V - E')\chi = 0. \quad (6c)$$

由(6c)式得

$$\chi = \frac{c}{2mc^2 + E' - V}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi, \quad (6d)$$

将(6d)式代入(6b)式得大分量 φ 的定态方程

$$h\varphi = E'\varphi, \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} h &= V + c^2\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \frac{1}{2mc^2 + E' - V}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ &= V + \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \frac{1}{1 + \frac{E' - V}{2mc^2}}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (7b) \end{aligned}$$

其中 $\frac{E' - V}{2mc^2}$ 在非相对论能量下是小量, 可按它展

开得到相对论修正. 在对哈密顿量(7b)的第二项做非相对论展开时, 可得包含一阶和二阶自旋效应的哈密顿量

$$\begin{aligned} h &= V + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left[-\frac{E' - V}{2mc^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{4m^2 c^2} p \left(\frac{E' - V}{2mc^2} \right) p + \dots \right] \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}. \quad (8) \end{aligned}$$

在推导上式时用到(5a)式, 方括号中的第二项是对其中一个因子 $(E' - V)$ 利用了近似 $E' - V \approx \frac{p^2}{2m}$, 并把动量算子对称化以保证哈密顿量(8)式的厄米性. (8)式中方括号内第一项内含 V 的部分导致一阶 Rashba 效应, 第二项内含 V 的部分导致二阶 Rashba 效应.

由(8)式可见, 自旋效应是相对论效应, 自旋效应特别是高阶自旋效应重要而需加以考虑的条件是: 1) 强电场或电场空间分布极不均匀, 有很大的梯度(这和固体边界效应有关); 2) 电子有效质量很小, 这与固体材料的性质(动量相关的平均场)有关; 3) 电子运动具有相对论性速度, 这属于高能电子学范围.

4. 二维问题, Rashba 效应

以下考虑一种简单的情形, 设粒子在 $x_3 = 0$ 的

平面内的某一区域内运动, 在此区域内电场均匀且垂直于此平面, 不考虑边缘效应, 设

$$\mathbf{p} = (p_1, p_2, 0), \quad V = \varepsilon x_3, \quad (9)$$

其中 ε 是实常数, 此时

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}V) \times \mathbf{p} &= -i\hbar\varepsilon(\mathbf{e}_3 \times \mathbf{p}) \\ &= -i\hbar\varepsilon(p_1\mathbf{e}_2 - p_2\mathbf{e}_1). \quad (10) \end{aligned}$$

由(5a)(5b)(10)式, 在(8)式中的相对论修正项中我们只取出有关自旋的项, 于是

$$\begin{aligned} h &= V + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{4m^2 c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}V\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ &\quad - \frac{1}{16m^4 c^4}p^2\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}V\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \dots \\ &= V + \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar\varepsilon}{4m^2 c^2}(\sigma_2 p_1 - \sigma_1 p_2) \\ &\quad - \frac{\hbar\varepsilon}{16m^4 c^4}p^2(\sigma_2 p_1 - \sigma_1 p_2) + \dots \\ &= V + \frac{p^2}{2m} - \lambda(\sigma_2 p_1 - \sigma_1 p_2) \\ &\quad - \mu p^2(\sigma_2 p_1 - \sigma_1 p_2) + \dots \\ &= \frac{p^2}{2m} + H_{\text{so}}^{(1)} + H_{\text{so}}^{(2)} + \dots \quad (11) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} H_{\text{so}}^{(1)} &= -\lambda(\sigma_2 p_1 - \sigma_1 p_2), \\ H_{\text{so}}^{(2)} &= -\mu p^2(\sigma_2 p_1 - \sigma_1 p_2) \quad (12a) \end{aligned}$$

$$\lambda \sim -\frac{\hbar\varepsilon}{4m^2 c^2}, \quad \mu \sim \frac{\hbar\varepsilon}{16m^4 c^4}, \quad (13)$$

称 $H_{\text{so}}^{(1)}, H_{\text{so}}^{(2)}$ 为一阶、二阶 Rashba 项; 称 λ, μ 为一阶、二阶 Rashba 常数. (13)式中的“ \sim ”表示“近似”, 是由于考虑到晶体场的实际情况与我们所用的以均匀电场作为等效平均场这一近似后, λ, μ 的值允许有所偏离. 记

$$\sigma_{\perp} = (\cos\theta\sigma_2 - \sin\theta\sigma_1) = e^{-i\theta\sigma_3/2}\sigma_2 e^{i\theta\sigma_3/2}, \quad (14)$$

其中 $\cos\theta = p_1/p, \sin\theta = p_2/p, \theta$ 是 \mathbf{p} 与 x_1 轴的夹角, 则

$$\begin{aligned} \sigma_{\perp} &= (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \cdot (-\sin\theta, \cos\theta, 0) \\ &= (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \cdot (\cos(\theta + \pi/2), \sin(\theta + \pi/2), 0), \end{aligned}$$

可见 σ_{\perp} 是 $\boldsymbol{\sigma}$ 在 $x_3 = 0$ 平面内沿垂直于 \mathbf{p} 方向的分量(见图1), 于是 $H_{\text{so}}^{(1)}, H_{\text{so}}^{(2)}$ 可写为

$$H_{\text{so}}^{(1)} = -\lambda p\sigma_{\perp}, \quad H_{\text{so}}^{(2)} = -\mu p^3\sigma_{\perp}. \quad (12b)$$

4.1. 一阶 Rashba 效应^[2]

考虑(11)式中的第一个自旋项, 令

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + H_{\text{so}}^{(1)} = \frac{p^2}{2m} - \lambda p\sigma_{\perp}, \quad (15)$$

显然 p_1, p_2, σ_{\perp} 是守恒量. H_1 称为一阶 Rashba 哈密顿量.

设 p_1, p_2, σ_{\perp} 及 H_1 的共同本征波函数是 $|E_{\pm}\rangle$,

$$H_1 |E_{\pm}\rangle = E_{\pm}^{(1)} |E_{\pm}\rangle, \quad (16a)$$

其中, $H_1 |E_{\pm}\rangle = E_{\pm}^{(1)} |E_{\pm}\rangle$ 表示 $H_1 |E_+\rangle = E_+^{(1)} |E_+\rangle$ 和 $H_1 |E_-\rangle = E_-^{(1)} |E_-\rangle$, 其他式子类似.

设 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ 是 σ_3 的自旋向上和向下的本征态即

$$\sigma_3 |\uparrow\rangle = + |\uparrow\rangle, \sigma_3 |\downarrow\rangle = - |\downarrow\rangle,$$

则

$$\sigma_2 \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \pm i |\downarrow\rangle) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \pm i |\downarrow\rangle),$$

$$\sigma_{\perp} e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_3} (|\uparrow\rangle \pm i |\downarrow\rangle) = \pm e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_3} (|\uparrow\rangle \pm i |\downarrow\rangle), \quad (16b)$$

$$\begin{aligned} |E_{\pm}\rangle &= \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x_1 + p_2 x_2)}}{\sqrt{2}} \\ &\times e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_3} (|\uparrow\rangle \pm i |\downarrow\rangle) \\ &= \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x_1 + p_2 x_2)}}{\sqrt{2}} \\ &\times (e^{-i\frac{\theta}{2}} |\uparrow\rangle \pm i e^{i\frac{\theta}{2}} |\downarrow\rangle), \end{aligned} \quad (17)$$

$$\sigma_{\perp} |E_{\pm}\rangle = \pm |E_{\pm}\rangle, \quad (16c)$$

对 (16b) 式的说明: 在 σ_3 表象下, 由 σ_2 的本征函数

$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \pm i |\downarrow\rangle)$ 做么正变换, 即左乘 $e^{-i\theta\sigma_3/2}$ 可得 $e^{-i\theta\sigma_3/2} \sigma_2 e^{i\theta\sigma_3/2}$ 即 σ_{\perp} 的本征波函数.

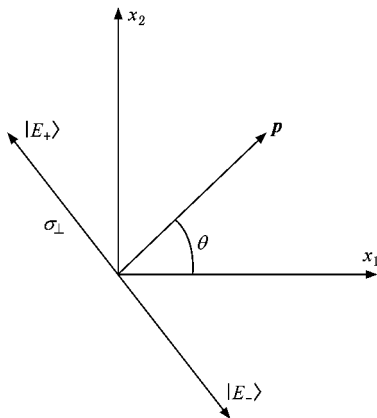


图 1 σ_{\perp} 的本征态

$$E_{\pm}^{(1)} = \frac{p^2}{2m} \mp \lambda p. \quad (18a)$$

$$E_-^{(1)} - E_+^{(1)} = 2\lambda p, \quad (19)$$

最低能量 $E_0 = -\frac{p_0^2}{2m}$ 对应的动量为

$$p_0 = \lambda m, \quad (20)$$

(18a) 式可改写

$$E_{\pm}^{(1)}(p) = \frac{1}{2m} (p \mp p_0)^2 + E_0. \quad (18b)$$

以上求解中我们通过守恒量 σ_{\perp} 的分析得到自旋波函数和能量本征值, 从过程中我们看到 σ_{\perp} 的物理意义及 σ_{\perp} 与 σ_2, σ_3 的关系. 当然也可以有其它类似的讨论^[15].

4.2. 二阶 Rashba 效应

考虑 (11) 式中 $H_{so}^{(1)}, H_{so}^{(2)}$ 两个自旋项, 令

$$\begin{aligned} H_2 &= \frac{p^2}{2m} + H_{so}^{(1)} + H_{so}^{(2)} \\ &= \frac{p^2}{2m} - \lambda p \sigma_{\perp} - \mu p^3 \sigma_{\perp}, \end{aligned} \quad (21)$$

H_2 称为二阶 Rashba 哈密顿量. 由 (21) 式可见: 二阶 Rashba 项 $H_{so}^{(2)}$ 与一阶 Rashba 哈密顿 H_1 对易, 因此二阶 Rashba 哈密顿量 H_2 本征波函数与一阶 Rashba 哈密顿量 (15) 式的本征波函数 (17) 式一样, 仅本征能量有一小的修正. 设 $E^{(2)}$ 为 H_2 的本征能量, 由 (16c) (21) 式可见

$$E_{\pm}^{(2)} = \frac{p^2}{2m} \mp p(\lambda + \mu p^2), \quad (22)$$

$$E_-^{(2)} - E_+^{(2)} = 2\lambda p + 2\mu p^3, \quad (23)$$

与 (19) 式比较, 二阶 Rashba 效应的两个本征能量的差比一阶 Rashba 效应的两个本征能量的差要大 $2\mu p^3$, 能量的最小值对应的动量 p_0 也会发生微小移动.

也可将 (22) (23) 式改写为

$$E_{\pm}^{(2)}(p) = \frac{p^2}{2m} \mp \lambda'(p)p, \quad (24)$$

$$E_-^{(2)} - E_+^{(2)} = 2\lambda'(p)p, \quad (25)$$

其中

$$\lambda'(p) = \lambda + \mu p^2, \quad (26)$$

即二阶 Rashba 效应对一阶 Rashba 效应的微小修正可以看做是对 Rashba 耦合常数 λ 的重整化, 变成微弱地依赖于 p 的跑动耦合常数 $\lambda'(p)$.

现估计一下 (21) 式或 (11) 式中两个自旋项的大

由 (15) (16c) 式可得我们熟悉的能级公式^[2]

小之比,由(13)式可见

$$\frac{\mu p^2}{\lambda} \sim \frac{\frac{\hbar \epsilon}{m^4 c^4} p^2}{\frac{\hbar \epsilon}{m^2 c^2}} = \frac{p^2}{m^2 c^2} \sim \frac{p^2}{m c^2}, \quad (27)$$

(27)式是电子动能与其静止能量之比.如电子动能为 1 eV,而电子静止能量 $m c^2 = 0.5 \text{ MeV}$,则(27)式的比值是 10^{-5} .由此可见,与一阶效应相比,二阶 Rashba 效应一般是非常小的.

- [1] Rashba E I 1960 *Sov. Phys. Solid State* **2** 1109
- [2] Bychkov Y A, Rashba E I 1984 *J. Phys. C* **17** 6039
- [3] Ohkawa F J, Uemura Y 1974 *J. Phys. Soc. Jpn.* **73** 1325
- [4] Ando T, Fowler A B, Stern F 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 437
- [5] Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H, Enoki T 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1335
- [6] Qiu Z J, Gui Y S, Shu X Z, Dai N, Guo S L, Chu J H 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1977 (in Chinese) [仇志军、桂永胜、疏小舟、戴宁、郭少令、褚君浩 2004 物理学报 **53** 1977]
- [7] Qiu Z J, Gui Y S, Shu X Z, Dai N, Guo S L, Chu J H 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1186 (in Chinese) [仇志军、桂永胜、疏小舟、戴宁、郭少令、褚君浩 2004 物理学报 **53** 1186]
- [8] Yang W, Chang K 2006 *Phys. Rev. B* **73** 113303
- [9] Jiang Z F, Li R D, Zhang S C, Liu W M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045201
- [10] Huang F J, Qi R, Li Y D, Liu W M 2007 *Europhys. Lett.* **79** 10004
- [11] Fu Y P, Wang D, Li Y D, Liu W M 2007 *J. Phys. : Condens. Matter* **19** 496220
- [12] Winkler R 2003 *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Berlin : Springer-Verlag)
- [13] Murakami S 2004 *Phys. Rev. B* **69** 241202
- [14] Wang S J 2005 *Advanced Quantum Mechanics and Quantum Many Body Theory* p51, 185 (Chengdu : Sichuan University Press) (in Chinese) [王顺金 2005 高等量子论与量子多体理论 (成都 : 四川大学出版社) 第 51, 185 页]
- [15] Feve G, Oliver W D, Aranzana M, Yamamoto Y 2002 *Phys. Rev. B* **66** 155328

Relativistic mean field theory of electron and first- , second-order Rashba effects ^{*}

Xu Jian-Wei Wang Shun-Jin[†]

(*Center of Theoretical Physics , School of Physics , Sichuan University , Chengdu 610064 , China*)

(Received 10 November 2008 ; revised manuscript received 13 December 2008)

Abstract

Within the framework of relativistic mean field theory- the Dirac equation of electrons in solid states , the electron spin dynamics and the related problems are discussed. Firstly , we discuss the high-order effects of electron spin dynamics by virtue of non-relativistic expansion of the Hamiltonian for large component of Dirac equation , the electron spin dynamics Hamiltonian including the first-order and second-order Rashba effects have been derived. In the case of two-dimension and perpendicular constant electric field , the corresponding eigenenergies and eigenfunctions of the spin dynamics Hamiltonian are obtained. Finally , the physical meaning and the magnitude of the correction of the second-order Rashba effect are discussed.

Keywords : second-order Rashba effect , spintronics , Dirac equation , relativistic mean field theory

PACC : 7110A , 7510D , 1110Q

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 90503008 and 10775100) , the Fund of Theoretical Nuclear Center of HIRFL of China.

[†] Corresponding author. E-mail : sjwang@home.swjtu.edu.cn