

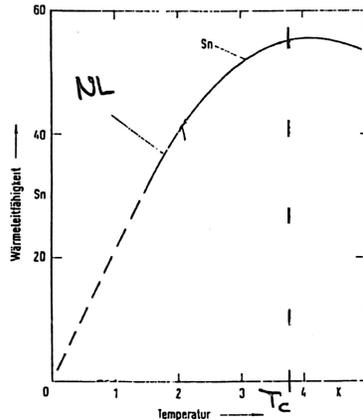
Übungen zur Vorlesung Festkörperphysik 2 WS 2019/20

Serie 4

Frage 1 Lesen Sie den beigefügten Text zum *Rashba-Effekt*! (Fragen dazu mündlich in der Übungsstunde.)

Frage 2 *Wärmeleitung in metallischen Supraleitern*

Welche Faktoren bestimmen in Festkörpern den Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten κ ? Warum sind Metalle bessere Wärmeleiter als Isolatoren? Welche Änderung von κ darf man erwarten, wenn ein Metall vom normal- in den supraleitenden Zustand übergeht? Skizzieren Sie diese Änderung in der beigefügten Graphik zu Zinn (Sprungtemperatur $T_c = 3,72$ K)!

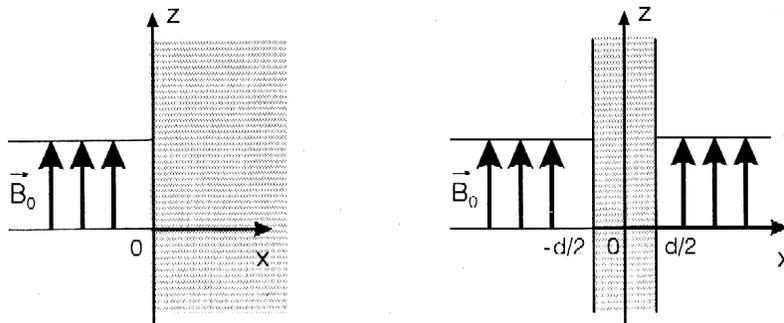


Frage 3 *Ausdehnung eines Cooper-Paars*

Schätzen Sie mit Hilfe der Unschärferelation die Ausdehnung ξ eines Cooper-Paars ab! Nutzen Sie dazu den Parameter Δ und Werte von E_F und k_F , wie sie in der Beschreibung eines Metalls durch ein Elektronengas auftreten, d. h. $E_F \approx 1000\Delta$ und $k_F \approx 10^8 \text{ cm}^{-1}$! Wieviele Leitungselektronen befinden sich bei einer Dichte von $5 \times 10^{22} \text{ e cm}^{-3}$ im Volumen einer Kugel mit dem Radius ξ ?

Frage 4 *Eindringen von B einen Supraleiter 1. Art*

Unten links ist schematisch ein Supraleiter im rechten Halbraum ($x \geq 0$) zu sehen. Im Außenraum ($x < 0$) herrscht das Magnetfeld B_0 . Berechnen Sie $B(x)$! Zeigen Sie, dass tief im Supraleiter das Feld praktisch verschwindet! Welcher magnetischen Suszeptibilität entspricht das? Erweitern Sie die obige Überlegung auf die rechts dargestellte supraleitende Platte der Dicke d : Berechnen Sie wieder $B(x)$! Was ergibt sich für das Eindringen eines B -Feldes in einen dünnen Supraleiter ($d \lesssim \lambda_L$)? Berechnen Sie \vec{j}_S für beide Anordnungen unter Verwendung der Beziehung $\mu_0 \vec{j}_S = \text{rot} \vec{B}$! Zeigen Sie, dass die kritische Feldstärke, die direkt mit der kritischen Stromdichte verbunden ist, in einem dünnen Supraleiter deutlich über der einer dicken Probe ($d \gg \lambda_L$) liegen kann!



12.5.4 Spin-Bahn-Wechselwirkung

Die Spin-Bahn-Wechselwirkung verursacht eine Kopplung zwischen dem Spin \mathbf{s} und Bahndrehimpuls $\boldsymbol{\ell}$ eines Elektrons zu einem Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j} = \boldsymbol{\ell} + \mathbf{s}$. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist typischerweise um den Faktor 10 bis 100 kleiner als die Austauschkopplung, die wir in Abschnitt 12.5.2 diskutiert haben. Trotzdem spielt sie für die magnetischen Eigenschaften von Festkörpern eine wichtige Rolle. Wir werden sie hier zuerst anhand einer semiklassischen Betrachtung einführen (siehe hierzu Abb. 12.14). Wir stellen uns dazu vor, dass der im Ruhesystem des Elektrons um dieses kreisende Kern mit Ladung Ze einen Kreisstrom I verursacht, der ein Magnetfeld $\mathbf{B}_{\text{orb}} = (\mu_0 I / 2r) \hat{\mathbf{n}}$ im Zentrum der Kreisbahn erzeugt (der Einheitsvektor $\hat{\mathbf{n}}$ steht senkrecht auf der von der Kreisbahn umschlossenen Fläche). Die Wechselwirkungsenergie zwischen dem Spin-Moment $\boldsymbol{\mu}_s = -g_s \mu_B \mathbf{s} / \hbar$ des Elektrons und diesem Feld können wir schreiben als

$$E_{\text{so}} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{orb}} = -\mu_s B_{\text{orb}} \cos \theta. \quad (12.5.15)$$

Benutzen wir die allgemeine Definition $\boldsymbol{\mu}_\ell = \pi r^2 I \hat{\mathbf{n}}$ für das magnetische Moment und außerdem den Zusammenhang $\boldsymbol{\mu}_\ell = (Ze/2m_e) \boldsymbol{\ell}$ zwischen magnetischem Moment und Bahndrehimpuls eines Elektrons, so erhalten wir für das durch den Kreisstrom erzeugte Feld den Ausdruck

$$\mathbf{B}_{\text{orb}} = \frac{\mu_0 \boldsymbol{\mu}_\ell}{2\pi r^3} = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi m_e r^3} \boldsymbol{\ell}. \quad (12.5.16)$$

Benutzen wir noch $\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$, so ergibt sich für die Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie

$$E_{\text{so}} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{orb}} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s}. \quad (12.5.17)$$

Für $\mu_s \simeq \mu_B$ erhalten wir $E_{\text{so}} \simeq 5.788 \times 10^{-5} \text{eV} \cdot B_{\text{orb}} [\text{T}]$. Da die gemessenen Werte von E_{so} im Bereich zwischen 10 und 100 meV liegen, sind die effektiven Felder B_{orb} beträchtlich.

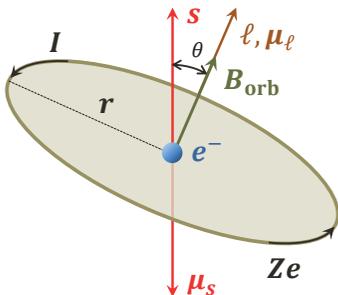


Abb. 12.14: Zur Veranschaulichung der physikalischen Ursache der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Im Ruhesystem des Elektrons bewegt sich der Kern mit Ladung Ze um das Elektron und verursacht an dessen Position ein Magnetfeld \mathbf{B}_{orb} , das mit dem Spin-Moment $\boldsymbol{\mu}_s$ des Elektrons wechselwirkt. Den Kreisstrom können wir mit einem magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}_\ell$ und dieses wiederum mit einem Bahndrehimpuls $\boldsymbol{\ell}$ assoziieren, so dass wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung als $\lambda \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s}$ schreiben können.

ab hier

Die quantenmechanische Berechnung der Spin-Bahn-Wechselwirkung beruht auf der Tatsache, dass die relative Bewegung zwischen Elektron und Kern in einem effektiven Magnetfeld (siehe hierzu Abb. 12.15)

$$\mathbf{B}^* = -\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{2c^2} = \frac{1}{2m_e c^2} (\mathbf{p} \times \nabla \phi_{\text{el}}) \quad (12.5.18)$$

resultiert, wobei $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\phi_{\text{el}}(\mathbf{r}, t)$. Den Operator für die Spin-Bahn-Wechselwirkung erhalten wir, indem wir die Wechselwirkung dieses Feldes mit dem Spin-Moment $\boldsymbol{\mu}_s = -g_s\mu_B\mathbf{s}/\hbar = -(e/m_e)\mathbf{s}$ eines Elektrons betrachten. Mit $\nabla\phi_{\text{el}}(r) = (\mathbf{r}/r)d\phi_{\text{el}}(r)/dr$ für ein Zentralpotenzial und $(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \ell$ erhalten wir

$$\mathcal{H}_{\text{so}} = \frac{e}{2m_e^2c^2}\mathbf{s} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla\phi_{\text{el}}) = \frac{e}{2m_e^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi_{\text{el}}(r)}{dr} \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s} = \lambda(r)\boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s}. \quad (12.5.19)$$

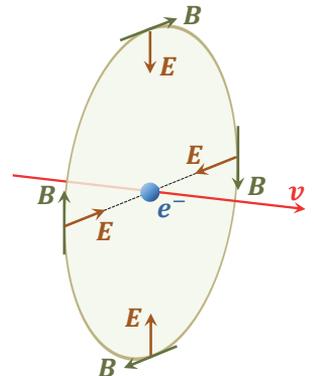
Der Erwartungswert der Spin-Bahn-Kopplungskonstante $\lambda(r)$ ist durch

$$\langle \lambda(r) \rangle = \int_0^\infty R_{nl}(r)\lambda(r)R_{nl}^*(r)r^2dr \quad (12.5.20)$$

gegeben und hängt von den Quantenzahlen n und l der jeweiligen radialen Wellenfunktion der Elektronenzustände ab. Verwenden wir $\phi_{\text{el}}(r) = Ze/4\pi\epsilon_0r$, so erhalten wir $\lambda(r) = Ze^2/8\pi\epsilon_0m_e^2c^2r^3$. Dieser Wert weicht vom klassisch ermittelten Wert um den so genannten Thomas-Faktor 2 ab.⁴⁸ Wichtig ist, dass die Spin-Bahn-Wechselwirkungsstärke proportional zum Gradienten $d\phi_{\text{el}}/dr$ des Coulomb-Potenzials ist, welcher für große Kernladungszahlen besonders groß ist. Im Rahmen des Bohrschen Atommodells gilt $\langle r \rangle = n^2 \frac{a_B}{Z}$ (n : Hauptquantenzahl, a_B : Bohrscher Radius). Daher ist λ am größten für die innerste Bohrsche Bahn ($n = 1$). Insgesamt wächst die Aufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung mit steigender Ordnungszahl Z also wie Z^4 an.⁴⁹

Gemäß der Definition der magnetostatischen Energie $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}$ eines magnetischen Moments $\boldsymbol{\mu}$ in einem externen Feld \mathbf{B}_{ext} entspricht die Energie $E_{\text{so}} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{orb}}$ dem Energiegewinn, den wir erhalten, wenn wir den Spin \mathbf{s} von einer zu $\boldsymbol{\ell}$ senkrechten in eine zu $\boldsymbol{\ell}$ parallelen Stellung bringen. Da das Bahnmoment häufig eine bestimmte kristallographische Richtung bevorzugt, wird sich auch der Spin \mathbf{s} parallel zu dieser Vorzugsrichtung einstellen wollen. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung bewirkt somit eine magnetokristalline Anisotropie, auf die

Abb. 12.15: Zur Veranschaulichung der elektrischen und magnetischen Felder einer Ladung in einem relativ zum Beobachter bewegten Bezugssystem. Für Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit ist das elektrische Feld auf die Ebene senkrecht zur Bewegungsrichtung konzentriert, da die Komponente parallel zu \mathbf{v} um den Faktor $1/\gamma^2 = [1 - (v^2/c^2)]$ reduziert und die Komponente senkrecht zu \mathbf{v} um den Faktor γ gegenüber dem Wert im Ruhesystem erhöht wird. Die sich bewegende Ladung resultiert in einem Magnetfeld $\mathbf{B} = -\mathbf{v} \times \mathbf{E}/c^2$, das in der Ebene senkrecht zu \mathbf{v} liegt. Dieser Feldwert ist um den Faktor 2 größer als das korrekte, aus der Dirac-Gleichung abgeleitete Ergebnis.



⁴⁸ L. H. Thomas, *The Motion of the Spinning Electron*, Nature 117, 514 (1926).

⁴⁹ Die genaue quantenmechanische Rechnung liefert bei Vernachlässigung der Einflüsse anderer Elektronen den Erwartungswert $\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{Z^3}{a_B^3 n^3 (l+1)(l+1/2)l}$.

wir in Abschnitt 12.7.2 noch eingehen werden. Die magnetokristalline Anisotropie ist von enormer Bedeutung für technische Anwendungen, da sie eine Vorzugsrichtung für die Magnetisierung festlegt und verhindert, dass die Magnetisierung ohne Energieaufwand in eine andere Richtung gedreht werden kann.

12.5.4.1 Rashba-Effekt

Eine interessante Manifestation der Spin-Bahn-Kopplung ist der Rashba-Effekt^{50,51} in zweidimensionalen (2D) Elektronengasen (vergleiche Abschnitt 7.4). Entscheidend für das Auftreten des Rashba-Effekts ist das Vorliegen einer gebrochenen Inversionssymmetrie. Ein zweidimensionales Elektronengas, wie es zum Beispiel in Halbleiter-Heterostrukturen auftritt, ist innerhalb der Bandverbiegungszone lokalisiert. Diese Bandverbiegung entspricht einem Potenzialgradienten, der senkrecht zur Grenzfläche ausgerichtet ist. Er führt zu einer Inversionsasymmetrie (wir sprechen hier von einer senkrechten strukturellen Inversionsasymmetrie, SIA) und resultiert im so genannten Rashba-Beitrag zur Spin-Bahn-Kopplung. Es ist bekannt, dass bei gleichzeitigem Vorliegen von Inversionssymmetrie [$E(\mathbf{k} \uparrow) = E(-\mathbf{k} \uparrow)$] und Zeitumkehrsymmetrie [Kramers-Entartung: $E(\mathbf{k} \uparrow) = E(-\mathbf{k} \downarrow)$] eine Entartung $E(\mathbf{k} \uparrow) = E(\mathbf{k} \downarrow)$ der beiden Spin-Zustände vorliegt. Der Rashba-Effekt hebt diese Entartung auf, was durch Messung des de Haas-van Alphen-Effekts nachgewiesen werden kann. Er führt damit zu spinpolarisierten elektronischen Zuständen. Wir weisen aber darauf hin, dass für inversionsasymmetrische Systeme bei gegebener Zeitumkehrsymmetrie ($B = 0$) nach wie vor eine Kramers-Entartung vorliegt (siehe Abb. 12.16).

Die Brechung der Inversionssymmetrie kann außer durch eine strukturelle Inversionsasymmetrie (SIA) auch durch eine gitterbedingte Asymmetrie (BIA: bulk inversion asymmetry) oder eine grenzflächenbedingte Asymmetrie (IIA: interface inversion asymmetry) verursacht werden. Die BIA ist unabhängig von jeglichen makroskopischen elektrischen Feldern und tritt in Kristallstrukturen ohne Inversionszentrum wie z. B. in der Zinkblendestruktur (GaAs, InSb, $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$) auf. Sie führt z. B. zur Dresselhaus-Spin-Bahn-Kopplung,⁵² auf die wir hier nicht eingehen wollen.

Wir diskutieren im Folgenden kurz den Rashba-Effekt für ein isotropes zweidimensionales Elektronengas. Der Gradient des Potenzials senkrecht zur Bewegungsebene (xy -Ebene) des Elektronensystems entspricht einem elektrischen Feld \mathbf{E} . Nach (12.5.18) resultiert dieses in einem effektiven Magnetfeld \mathbf{B}^* im Ruhesystem des Elektrons, welches wiederum in einer Aufspaltung

$$E_{\text{so}} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}^* = -\frac{e}{2m_e c^2} (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{s}. \quad (12.5.21)$$

⁵⁰ E. I. Rashba, *Properties of Semiconductors with an Extremum Loop. 1. Cyclotron and Combinational Resonance in a Magnetic Field Perpendicular to the Plane of the Loop*, Sov. Phys. Solid State. **20**, 1109-1122 (1960).

⁵¹ Roland Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer Verlag, Berlin (2003).

⁵² G. Dresselhaus, *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures*, Phys. Rev. **100**, 580-586 (1955).

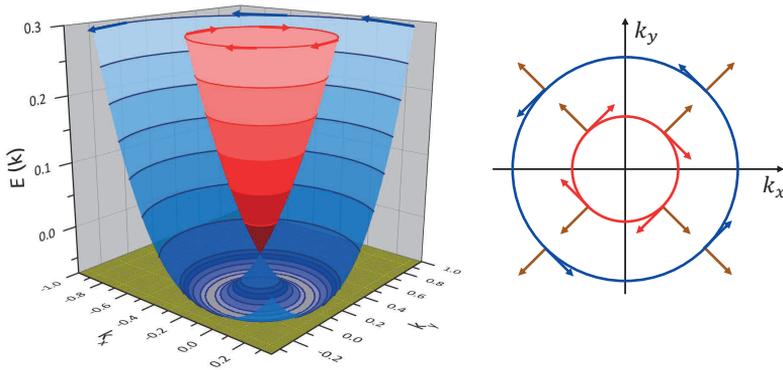


Abb. 12.16: Dispersionsrelation eines 2D-Elektronengases mit endlicher Rashba-Kopplung, die zu einer Aufspaltung von Zuständen mit entgegengesetzter tangentialer Spin-Richtung führt (blauer und roter Paraboloid). Rechts ist ein Schnitt für $E(\mathbf{k}) = \text{const.}$ gezeigt. Die Spin-Richtung (rote und blaue Pfeile) stehen jeweils senkrecht auf dem \mathbf{k} -Vektor (braune Pfeile), sind aber für die beiden Paraboloiden in entgegengesetzte tangentiale Richtung ausgerichtet.

resultiert, wobei $\boldsymbol{\mu}_s = -g_s \mu_B \mathbf{s} / \hbar = -(e/m_e) \mathbf{s}$ das Spin-Moment des Elektrons ist. Wir können deshalb den Hamilton-Operator für den Rashba-Effekt allgemein schreiben als

$$\mathcal{H}_{\text{Rashba}} = \alpha (\widehat{\mathbf{E}} \times \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (12.5.22)$$

wobei $\mathbf{k} = m\mathbf{v}/\hbar$, $\widehat{\mathbf{E}}$ der Einheitsvektor in Feldrichtung und $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ der Vektor der Pauli-Matrizen ist. Die Stärke des Rashba-Effekts wird durch den Rashba-Parameter $\alpha = eE/2m_e^2c^2$ quantifiziert.

In der Dispersionsrelation des 2D-Elektronengases (siehe Abb. 12.16) äußert sich der Rashba-Effekt in einer gegenseitigen Verschiebung der zunächst für beide Spin-Richtungen entarteten Bandparabeln. Die Impulsverteilung für konstante Energie besteht aus konzentrischen Kreisen. Die Spin-Polarisation dieser beiden elektronischen Zustände ist vollständig (100%) und tangential ausgerichtet (innerhalb der xy -Ebene und senkrecht zur Ausbreitungsrichtung). Aufgrund der Zeitumkehrsymmetrie bleibt das System nichtmagnetisch.

Ähnliche Effekte wie in Halbleiter-Heterostrukturen erwarten wir für Metalloberflächen. Dabei übernehmen Oberflächenzustände die Rolle des zweidimensionalen Elektronengases. Unter Oberflächenzuständen verstehen wir elektronische Zustände, die auf wenige Atomschichten an der Probenoberfläche lokalisiert sind. Der Potenzialgradient wird durch die Oberflächenbarriere zum Vakuum, das so genannte Bildladungspotenzial, erzeugt. Der daraus resultierende Rashba-Effekt führt zu einer spinpolarisierten, aufgespaltenen Oberflächenbandstruktur.