**WWU Münster**

**Fachbereich Physik**

# Rashba-Effekt mit zusätzlichem Magnetfeld

**Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie, WS 2014/15**

**Ausarbeitung von:** Phong-Minh Timmy Ly
**E-Mail:** p_ly0001@uni-muenster.de

**Betreuer:** Prof. Dr. P. Krüger

29.01.2015

# Inhaltsverzeichnis

**1 Einführung** **3**
1.1 Wiederholung: anomaler Zeeman-Effekt . . . . . 4

**2 Lösung der Schrödingergleichung** **5**
2.1 Allgemeine Energiedispersion . . . . . 5
2.2 Bekannter Fall: kein Magnetfeld . . . . . 7
2.3 Fall: Mit Magnetfeld und ohne Spin-Bahn-Kopplung . . . . . 8
2.4 Spezialfall: Wellenvektor ist senkrecht zum Magnetfeld . . . . . 9
2.5 Spezialfall: Wellenvektor ist parallel zum Magnetfeld . . . . . 12

**3 Weitere Diskussion der Ergebnisse** **14**

**4 Untersuchungen an Gadolinium** **16**

**5 Zusammenfassung** **18**

**6 Literaturverzeichnis** **19**

**7 Anhang** **20**

# 1 Einführung

Der Rashba-Effekt ist ein Effekt der Spin-Bahn-Kopplung bei Oberflächenzuständen von Festkörpern. In dieser Ausarbeitung wird der Rashba-Effekt an Oberflächen magnetischer Festkörper behandelt. Die Kenntnis des Rashba-Effekts für den Fall nicht-magnetischer Festkörper wird als bekannt vorausgesetzt. Sollte diese nicht vorhanden sein, so wird auf die Ausarbeitung[1] von Tobias Frohoff-Hülsmann verwiesen.

Wie auch schon bei Oberflächen nicht-magnetischer Festkörper bietet es sich an das Modell des zweidimensionalen Elektronengas (2DEG) zu verwenden und die entsprechende Schrödingergleichung zu lösen. Aufgrund des Magnetfelds taucht ein zusätzlicher Term im Hamiltonoperator auf, der Zeeman-Term. Der Hamiltonian besteht daher aus einem kinetischen Term, dem Rashba-Term und dem Zeeman-Term.

$$H = H_{\text{kin}} + H_R + H_Z \tag{1}$$

Für die Herleitung des Rashba-Terms wird hier wieder auf [1] hingewiesen. Der Zeeman-Effekt wird jedoch kurz wiederholt.

## 1.1 Wiederholung: anomaler Zeeman-Effekt

Elektronen besitzen einen Spin $\vec{S}$, welcher bekanntermaßen mit einem magnetischen Moment verknüpft ist[2].

$$\vec{\mu} = -g\frac{e}{2m}\vec{S}\ . \tag{2}$$

Dabei ist $e$ der Betrag der Elementarladung, $g$ der Lande-Faktor und $m$ die Elektronenmasse. Befindet sich ein magnetisches Moment in einem Magnetfeld $\vec{B}$, so erfährt es ein Potential

$$V = -\vec{\mu}\vec{B} =: H_Z\ . \tag{3}$$

Setzt man (2) in (3) ein, wobei $g \approx 2$ ist, so ergibt sich

$$H_Z = \frac{e}{m}\vec{B}\vec{S} = \frac{\epsilon_Z}{2B}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\ . \tag{4}$$

Dabei wird die Zeeman-Energie zu $\epsilon_Z := \frac{e\hbar}{m}B$ definiert.

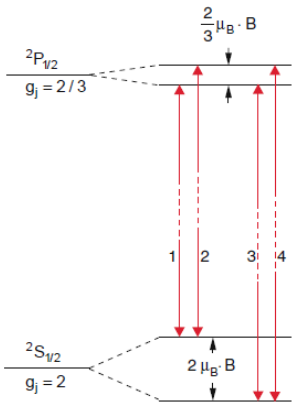



Abbildung 1: Termschema von Natrium mit Spin-Bahn-Kopplung[3]

In Abb. 1 ist die Feinstrukturaufspaltung vom Natriumatom aufgezeichnet. Man betrachte nur den $^2S_{1/2}$-Zustand. Die Aufspaltung wird durch den anomalen Zeeman-Effekt hervorgerufen und die Energiedifferenz ist genau die Zeeman-Energie $\epsilon_Z$.
Aus Gleichung (4) geht außerdem hervor, dass ein Spin, welcher parallel zum Magnetfeld ausgerichtet ist, zu einer Energieerhöhung führt. Damit ist in Abb. 1 der untere Zustand (Energieabsenkung) durch ein Spin-$\downarrow$ Elektron und der obere durch Spin-$\uparrow$ besetzt.

# 2 Lösung der Schrödingergleichung

Gesucht sind die Energieeigenwerte (bzw. Energiedispersionsrelation) und die Eigenfunktionen. Der Hamiltonian lautet

$$H = \frac{p^2}{2m}\sigma_0 + \frac{\zeta}{\hbar}[p_x\sigma_y - p_y\sigma_x] + \frac{\epsilon_Z}{2B}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\ . \tag{5}$$

$p$ ist der Impuls des Elektrons, $m$ die effektive Masse und $\sigma$ sind die Pauli-Matrizen. Da die Schrödingergleichung in Matrizenform gelöst wird, steht bereits die Einheitsmatrix $\sigma_0$ beim kinetischen Term dabei. Die Konstante $\zeta$ wird in [1] hergeleitet. Es ist nur nötig zu wissen, dass sie zum Rashba-Term gehört. In diesem Abschnitt wird nicht nur die Schrödingergleichung gelöst, sondern es werden auch die Ergebnisse gewisser Spezialfälle diskutiert.

## 2.1 Allgemeine Energiedispersion

Die typische stationäre Schrödingergleichung lautet

$$H\psi = E\psi\ . \tag{6}$$

Um die nachfolgenden Rechnungen zu vereinfachen, wird zur Energie $E$ ein Offset $-\frac{\hbar^2}{2m}k_R^2$ eingeführt. Anschließend wird $\frac{\hbar^2}{2m}$ ausgeklammert[4].

$$E \to E - \frac{\hbar^2}{2m}k_R^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2m}{\hbar^2}E - k_R^2\right)$$

Der Klammerausdruck wird mit $\varepsilon := \left(\frac{2m}{\hbar^2}E - k_R^2\right)$ bezeichnet. $k_R^2$ ist eine Konstante, welche die Größe $\zeta$ des Rashba-Terms beinhaltet: $k_R = \frac{m}{\hbar^2}\zeta$. Es wird außerdem die Konstante $k_Z^2 = \frac{m}{\hbar^2}\frac{\epsilon_Z}{2}$ eingeführt. Wichtig wird später nur sein, dass $k_R$ für die Stärke des Rashba-Effekts bzw. der Spin-Bahn-Kopplung steht und $k_Z$ für die Stärke des Zeeman-Effekts. Die Begriffe 'Rashba-Term/-Effekt' und 'Spin-Bahn-Kopplung' (SBK) werden synonym verwendet.
Einsetzen der Ausdrücke in (6) führt zu folgender SGL:

$$\left(\frac{p^2}{2m}\sigma_0 + \frac{\hbar}{m}k_R[p_y\sigma_x - p_x\sigma_y] + \frac{\hbar^2 k_Z^2}{mB}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\right)\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\varepsilon\psi\ . \tag{7}$$

Zur Lösung dieser Gleichung wird eine ebene Welle mit Spinor angesetzt. $\vec{k}$ ist der Wellenvektor.

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi}e^{i\vec{k}\vec{r}}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \psi_{\text{Ort}}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{8}$$

Da ein 2DEG betrachtet wird, werden Magnetfeld $\vec{B}$ und Wellenvektor $\vec{k}$ in die xy-Ebene gelegt.

$$\vec{B} = (B_x, B_y, 0) = (B\cos\gamma, B\sin\gamma, 0)$$

$$\vec{k} = (k_x, k_y, 0) = (k\cos\phi, k\sin\phi, 0)$$

Damit charakterisiert $\gamma$ die Richtung des $B$-Felds und $\phi$ die Richtung des Wellenvektors.

Zunächst ist eine allgemeine Vorschrift für die Energiedispersion gesucht. Dafür werden die Auswirkungen der einzelnen Terme im Hamiltonian auf die Wellenfunktion $\psi$ ausgewertet (Anhang S. 20). Es ergibt sich diese vektorwertige Gleichung.

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \frac{\hbar^2 k_R}{m}\left[k_y \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} - ik_x \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix}\right] +$$
$$\frac{\hbar^2 k_Z^2}{mB}\left[B_x \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} + iB_y \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix}\right] - \frac{\hbar^2}{2m}\varepsilon \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \tag{9}$$

Es wird mit $\frac{2m}{\hbar^2}$ multipliziert und die vektorwertige Gleichung wird über ihre zwei Komponenten in zwei separate Gleichungen getrennt.

$$(k^2 - \varepsilon)a + 2k_R(k_y + ik_x)b + \frac{2k_Z^2}{B}(B_x - iB_y)b = 0 \tag{10}$$

$$(k^2 - \varepsilon)b + 2k_R(k_y - ik_x)a + \frac{2k_Z^2}{B}(B_x + iB_y)a = 0 \tag{11}$$

Die Klammern, welche die Komponenten des Wellenvektors oder des Magnetfelds enthalten, können vereinfacht werden.

$$k_y + ik_x = k(\sin\phi + i\cos\phi) = ik(-i\sin\phi + \cos\phi) = ike^{-i\phi}$$

Analog erhält man

$$k_y - ik_x = -ike^{i\phi} \qquad B_x + iB_y = Be^{i\gamma} \qquad B_x - iB_y = Be^{-i\gamma}\ .$$

Nach Einsetzen ergibt sich ein Gleichungssystem[4], welches als Matrix betrachtet werden kann, ein typisches Eigenwertproblem.

$$(k^2 - \varepsilon)a + (2k_Z^2 e^{-i\gamma} + 2ik_R k e^{-i\phi})b = 0 \tag{12}$$

$$(2k_Z^2 e^{i\gamma} - 2ik_R k e^{i\phi})a + (k^2 - \varepsilon)b = 0 \tag{13}$$

$$\det\begin{pmatrix} k^2 - \varepsilon & 2k_Z^2 e^{-i\gamma} + 2ik_R k e^{-i\phi} \\ 2k_Z^2 e^{i\gamma} - 2ik_R k e^{i\phi} & k^2 - \varepsilon \end{pmatrix} = 0 \tag{14}$$

Mit

$$\left(2k_Z^2 e^{-i\gamma} + 2ik_R k e^{-i\phi}\right)\left(2k_Z^2 e^{i\gamma} - 2ik_R k e^{i\phi}\right)$$
$$= 4k_Z 4 - 4ik_Z^2 k_R k e^{i(\phi-\gamma)} + 4ik_Z^2 k_R k e^{-i(\phi-\gamma)} + 4k_R^2 k^2$$
$$= 4k_Z^4 + 4k_R^2 k^2 + 8k_Z^2 k_R k \sin(\phi - \gamma)$$

ergibt sich nach Wurzelziehen die Gleichung

$$(k^2 - \varepsilon) = \pm\sqrt{4k_Z^4 + 4k_R^2 k^2 + 8k_Z^2 k_R k \sin(\phi - \gamma)}\ . \tag{15}$$

Schreibt man $\varepsilon$ wieder in die Energie $E$ um, so erhält man schließlich die Energiedispersion eines zweidimensionalen Elektronengases im Magnetfeld.

$$\boxed{E(k,\phi,\gamma) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 + k_R^2 \pm 2\sqrt{k_Z^4 + k_R^2 k^2 + 2k_Z^2 k_R k \sin(\phi-\gamma)}\right)}$$

Auf dem ersten Blick erkennt man den $k^2$-Term, welcher dem des freien Teilchens entspricht. Die Rashba-Konstante $k_R$ sorgt für einen Offset der Energie. Der Wurzelterm jedoch lässt sich nicht so einfach deuten. Aus diesem Grund wird im Nachfolgenden auf verschiedene Spezialfälle eingegangen.

## 2.2 Bekannter Fall: kein Magnetfeld

Der Grenzfall eines verschwindenden Magnetfelds ist in obiger Gleichung enthalten. Um dies zu sehen, reicht es $B = 0$ zu setzen, wodurch alle Zeeman-Terme $k_Z$ verschwinden.

$$E(B=0) = \frac{\hbar^2}{2m}(k \pm k_R)^2 \tag{16}$$

Die Energiedispersion hat die bekannte Form zweier horizontal verschobener Parabeln. Da die Energie jedoch nur vom Betrag des Wellenvektors abhängt, gilt das positive Vorzeichen für den roten Teil der Kurven und das negative für den grünen Teil in Abb. 2.

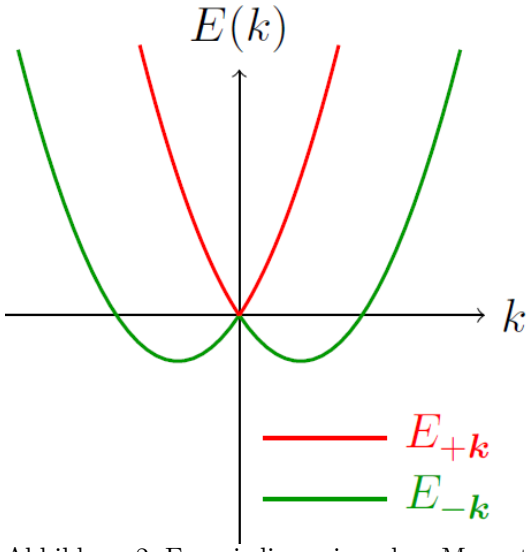



Abbildung 2: Energiedispersion ohne Magnetfeld[5]

Die Kurven sind noch mit einem Offset von $-\frac{\hbar^2}{2m}k_R^2$ versehen, was nicht weiter von Bedeutung ist.
Nicht miteingezeichnet ist die Spinpolarisation. Der Spin ist senkrecht zum Wellenvektor ausgerichtet, d.h. er zeigt tangential[1] zu den Paraboloiden (wenn man sich die Energiedispersion dreidimensional vorstellt).

## 2.3 Fall: Mit Magnetfeld und ohne Spin-Bahn-Kopplung

Als Nächstes wird die Dispersion ohne Spin-Bahn-Kopplung betrachtet, d.h. $k_R$=0. Es ist vorab anzumerken, dass die Abbildungen für ein Magnetfeld in $-\vec{e}_x$-Richtung erstellt worden sind.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 \pm 2k_Z^2\right) \tag{17}$$

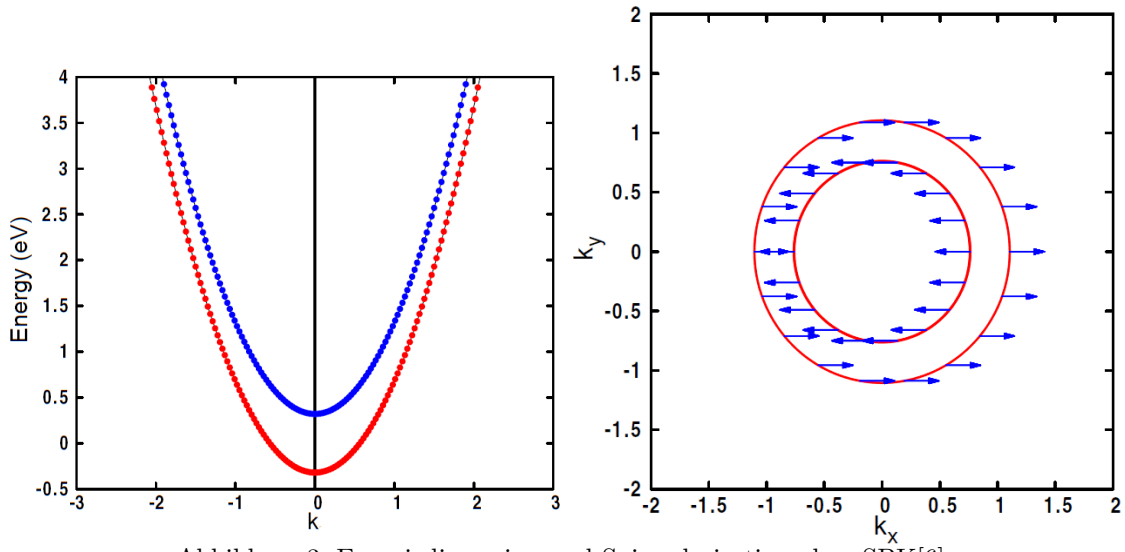



Abbildung 3: Energiedispersion und Spinpolarisation ohne SBK[6]

Wie erwartet wird die Parabel des freien Elektronengases aufgrund des Zeeman-Effekts nach oben bzw. unten verschoben (Abb. 3 links). Stellt man sich die Energiedispersion dreidimensional vor mit den beiden Wellenvektorkomponenten $k_x$ und $k_y$ als zwei Achsen und mit der Energie als dritte Achse, so ergibt sich die rechte Abbildung, wenn man einen Querschnitt bei konstanter Energie macht. Der Schnitt durch die beiden Parabeln entspricht zwei konzentrischen Kreisen, schließlich ist die Energie richtungsunabhängig. Die blauen Pfeile stellen die Polarisation bzw. die Richtung des Spins in Abhängigkeit vom Wellenvektor dar (hier ohne Herleitung). Es ist aber intuitiv, dass sich der Spin parallel oder antiparallel zum Magnetfeld ausrichten muss. Bei der roten Parabel führt der Zeeman-Effekt zu einer Energieabsenkung. Dies entspricht im Querschnitt dem äußeren Kreis. Dort ist der Spin antiparallel zum Magnetfeld ausgerichtet. Erinnern wir uns an Abschnitt 1.1, so wurde dort ebenfalls gesagt, dass ein antiparallel ausgerichteter Spin zu einer Energieabsenkung führt. Analog ist der Spin parallel ausgerichtet für die obere Parabel.

Da die bekannten Fälle nun kurz beleuchtet wurden, wird jetzt auf zwei interessantere Spezialfälle eingegangen. Wir untersuchen die Energiedispersion und Spinpolarisation für Wellenvektoren, die senkrecht oder parallel zum Magnetfeld zeigen.

## 2.4 Spezialfall: Wellenvektor ist senkrecht zum Magnetfeld

Es wird wieder mit der allgemeinen Energiedispersion begonnen.

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 + k_R^2 \pm 2\sqrt{k_Z^4 + k_R^2 k^2 + 2k_Z^2 k_R k \sin(\phi - \gamma)}\right)}$$

Das Magnetfeld zeigt in positive x-Richtung

$$\vec{B} = (B\cos\gamma, B\sin\gamma, 0) \stackrel{!}{=} (B, 0, 0), \tag{18}$$

d.h. $\gamma = 0$. Damit wird aus $k\sin(\phi - \gamma) = k\sin(\phi) = k_y$. Wird nur die zum Magnetfeld senkrechte Komponente des Wellenvektors betrachtet, d.h. $k_x = 0$, so gilt $k^2 = k_y^2$. Die Ausdrücke 'zum Magnetfeld senkrechte Komponente des Wellenvektors' und $k_y$ werden von nun an synonym verwendet. Das gilt auch für $k_x$ und die 'parallele' Komponente. Der Ausdruck unter der Wurzel lässt sich jetzt per binomischer Formel zusammenfassen und die Wurzel auswerten.

$$E(k_y) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + k_R^2 \pm 2|k_Z^2 + k_R k_y|)\ . \tag{19}$$

Bevor diese Dispersionsrelation gezeichnet wird, ist noch die Spinpolarisation zu ermitteln. Dazu werden die Eigenfunktionen des Systems benötigt. Deren Spinanteil steht für die Ausrichtung des Spins. Wir erinnern uns an das Gleichungssystem auf S. 6 :

$$(k^2 - \varepsilon)a + 2k_R(k_y + ik_x)b + \frac{2k_Z^2}{B}(B_x - iB_y)b = 0 \tag{20}$$

$$(k^2 - \varepsilon)b + 2k_R(k_y - ik_x)a + \frac{2k_Z^2}{B}(B_x + iB_y)a = 0\ . \tag{21}$$

Die Variablen $a$ und $b$ waren gerade die Komponenten des angesetzten Spinanteils. Diese beiden Gleichungen sind äquivalent, von daher wird eine ausgewählt. Unter dem betrachteten Spezialfall wird aus (19):

$$(k_y^2 - \varepsilon)a + 2k_R k_y b + 2k_Z^2 b = 0 \tag{22}$$

Da die Energie (19) bekannt ist, lässt sich die Gleichung mit $\varepsilon = \left(\frac{2m}{\hbar^2}E - k_R^2\right)$ zu

$$\mp 2|k_Z^2 + k_R k_y|a + 2(k_R k_y + k_Z^2)b = 0 \tag{23}$$

umformen. Per Fallunterscheidung werden die Betragsstriche ausgewertet. Für

$$(k_Z^2 + k_R k_y) \geq 0 \ \Leftrightarrow\ \underline{k_y \geq -\frac{k_Z^2}{k_R}}$$

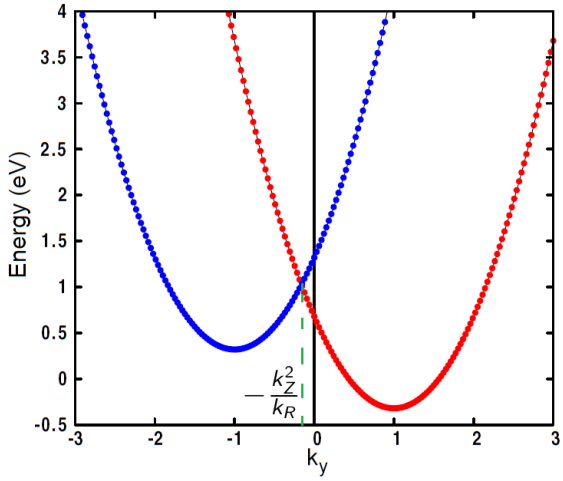
ergibt sich $\pm a = b$. Mit der Normierungsbedingung $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ist der Spinor

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \mathrel{\widehat{=}} \pm \vec{e}_x \ . \tag{24}$$

Zweidimensionale, aber komplexe, Spinore lassen sich in dieser Form der räumlichen Orientierung des Spins zuordnen[1]. Hier zeigt der Spin in ±x-Richtung, je nach dem welches Vorzeichen in der Energiedispersion betrachtet wird.
Analog ergibt sich für $\underline{k_y < -\frac{k_Z^2}{k_R}}$ der Spinor

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp 1 \end{pmatrix} \mathrel{\widehat{=}} \mp \vec{e}_x \ . \tag{25}$$

Zeigt der Wellenvektor senkrecht zum Magnetfeld, dann richtet sich der Spin also nur parallel oder antiparallel aus. Er erhält nie eine zum Magnetfeld senkrechte Komponente ($\vec{e}_y$).




$$E(k_y) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + k_R^2 \pm 2|k_Z^2 + k_R k_y|)$$

$$\boxed{k_y < -\frac{k_Z^2}{k_R}} : \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp 1 \end{pmatrix} \mathrel{\widehat{=}} \mp \vec{e}_x$$

$$\boxed{k_y \geq -\frac{k_Z^2}{k_R}} : \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \mathrel{\widehat{=}} \pm \vec{e}_x$$

Abbildung 4: Energiedispersion für $\vec{k} \perp -B\vec{e}_x$

In Abb. 4 ist die Energiedispersion aufgetragen. Auf den ersten Blick sind wieder zwei Parabeln zu sehen, sie sind sowohl vertikal, als auch horizontal gegeneinander verschoben. Wie zuvor steht ein Vorzeichen in der Dispersionsgleichung nicht für eine der Parabeln. Das obere Vorzeichen steht für die Kurve, welche zunächst von links den roten Parabelzweig bis $k_y = -\frac{k_Z^2}{k_R}$ entlang geht, aber dann in den blauen Zweig übergeht. Das untere Vorzeichen steht für die Kurve, die von links den blauen Parabelzweig bis zum Schnittpunkt läuft und dann in die rote Kurve übergeht. D.h. das obere Vorzeichen steht für die 'inneren' Zweige der beiden Parabeln und das untere Vorzeichen für die 'äußeren'. Vergleicht man diese Abbildung mit den Abbildungen (2) und (3), so sieht man gut, dass hier sowohl der Einfluss des Magnetfelds, als auch die Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigt wurden. Der eine führt zum Energie-Offset und der andere zum Wellenvektor-Offset.
Die Vorzeichen der Energiedispersion werden nicht durch die Farben widergespiegelt.

Sie stehen jedoch für die Spinpolarisation. Tatsächlich zeigt der Spin für Elektronen, deren Energie und Wellenzahl sich wie die blaue/linke Parabel verhalten, in x-Richtung ($\vec{B} = \vec{e}_x$). Er ist also parallel zum Magnetfeld ausgerichtet. Dies wird klar, wenn man in Gedanken die blaue Parabel entlanggeht und die obigen Relationen beachtet. Beginnt man bei negativen $k_y$ auf der blauen Parabel, so ist zunächst das untere Vorzeichen zu beachten. Da man sich noch links vom Schnittpunkt befindet, zeigt der Spin also in $+\vec{e}_x$-Richtung. Passiert man den Schnittpunkt und geht weiter die blaue Parabel entlang, so geht man zum oberen Vorzeichen über. Der Spin zeigt immer noch in $+\vec{e}_x$-Richtung. Analog kann man es sich für die rote Parabel überlegen. Der Spin zeigt dort antiparallel zum Magnetfeld. An dieser Stelle soll nochmal deutlich gesagt werden, dass die Abbildungen sich auf ein Magnetfeld in $-\vec{e}_x$-Richtung beziehen.
Die Quintessenz aus der Betrachtung der zum Magnetfeld senkrechten Wellenvektorkomponente ist, dass der Spin je nach Parabel parallel oder antiparallel zum Magnetfeld zeigt.

## 2.5 Spezialfall: Wellenvektor ist parallel zum Magnetfeld

Zuletzt wird der Fall eines parallel zum Magnetfeld orientierten Wellenvektors untersucht. Es wird genauso vorgegangen wie im vorherigen Abschnitt. Auf eine ausführliche Herleitung wird hier verzichtet. Aus der allgemeinen Energiedispersion ergibt sich mit einer verschwindenden $k_y$-Komponente folgende Dispersionsrelation[4].

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_R^2 \pm 2\sqrt{k_Z^4 + k_R^2 k_x^2}\right) \tag{26}$$

Der Spinanteil der Eigenfunktion ist

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\arctan\left(\frac{k_R}{k_Z^2}k_x\right)} \end{pmatrix} \tag{27}$$

Hier ist es sinnvoll die Grenzfälle $k_x = 0$, $k_x \to \infty$ und $k_x \to -\infty$ zu betrachten. Denn dann nimmt der Spinor folgende Werte an:

| $\underline{k_x = 0}$ | $\underline{k_x \to -\infty}$ | $\underline{k_x \to \infty}$ |
|---|---|---|
| $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \mathrel{\widehat{=}} \pm\,\vec{e}_x$ | $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \mathrel{\widehat{=}} \pm\,\vec{e}_y$ | $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \mathrel{\widehat{=}} \mp\,\vec{e}_y$ |

Im nachfolgenden Bild ist diesmal auch die Spinpolarisation mit eingezeichnet. Die vertikale Achse ist dabei nicht nur eine Energieachse bezüglich der Dispersion, sondern auch die y-Achse bezüglich der Spinpolarisationspfeile.

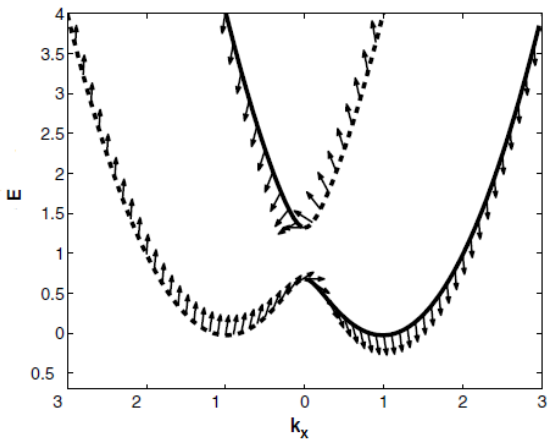



Abbildung 5: Energiedispersion für $\vec{k} \parallel -B\vec{e}_x$ mit Spinpolarisation[4]

Auch in dem hier betrachteten Fall nimmt die Energiedispersion in weiten Bereichen die Form zweier Parabeln an. Das obere/untere Vorzeichen in (26) steht hier ebenfalls für die 'inneren'/'äußeren' Parabelzweige. Im Gegensatz zu vorher sind sie jedoch nicht vertikal gegeneinander verschoben. Stattdessen befindet sich bei $k_x = 0$ eine Lücke. Diese

wird auch 'Pseudogap' bezeichnet ('Pseudo', da die Energien an der Stelle bei größeren $k_x$ immer noch eingenommen werden). Dass diese Lücke wirklich dort sein muss, sieht man, wenn man in Gleichung (26) $k_x = 0$ setzt. An der Stelle 0 nimmt die Energie zwei verschiedene Werte an. Die Energiedifferenz entspricht genau der Zeeman-Energie $\epsilon_Z$. Die Stärke des Magnetfelds wirkt sich also auf die Größe des Pseudogaps aus, während die horizontale Verschiebung hauptsächlich vom Rashba-Term kommt.
Unter Berücksichtigung, dass das Magnetfeld in der Abbildung in $-\vec{e}_x$-Richtung ausgerichtet ist, sind die Vektorpfeile richtig eingezeichnet. Bei $k_x = 0$ zeigt der Spin parallel oder antiparallel zum Magnetfeld, während er für größer werdende $|k_x|$ mehr und mehr senkrecht zum Magnetfeld zeigt. Dies geschieht bei der linken Parabel in $+\vec{e}_y$-Richtung und bei der rechten in $-\vec{e}_y$-Richtung.

# 3 Weitere Diskussion der Ergebnisse

Nach Betrachtung der senkrechten und parallelen Komponenten des Wellenvektors lässt sich sagen, dass nicht nur die Energiedispersion nicht mehr richtungsunabhängig ist, sondern auch der Spin sich überhaupt nicht mehr so verhält wie im Fall des nicht vorhandenen Magnetfelds.

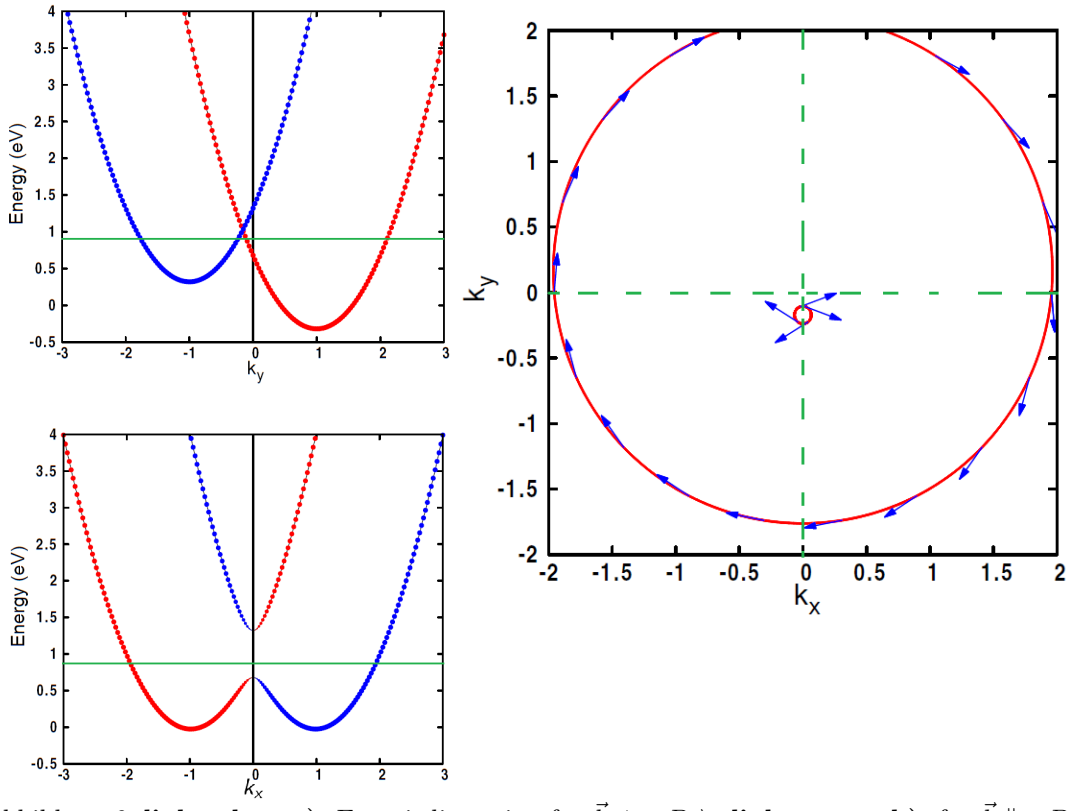



Abbildung 6: **links oben a):** Energiedispersion für $\vec{k} \perp -B\vec{e}_x$; **links unten b):** für $\vec{k} \parallel -B\vec{e}_x$ und **rechts c):** Querschnitt bei $E = 0.9$ mit Spinpolarisation

Qualitativ lässt sich das Verhalten der Energiedispersion für beliebige $k$ wie folgt beschreiben: Man betrachte Wellenvektoren ohne y-Komponente, d.h. die Dispersion sieht wie der Graph in Abbildung 6.a) aus. Erhöht man nach und nach die y-Komponente und verringert die x-Komponente, so schließt sich das Pseudogap langsam und die Parabelminima verschieben sich vertikal gegeneinander bis der Graph Abb.6.b) entspricht.

Würde man die allgemeine Energiedispersion für beliebige Wellenvektoren zeichnen und anschließend bei $E = 0.9$ einen Schnitt machen, so ergäbe sich Darstellung c). Ohne Magnetfeld erwartet man zwei konzentrische Kreise. Der Einfluss des Magnetfelds verschiebt die Kreise gegeneinander. Für $k_x = 0$ oder $k_y = 0$ findet man die zuvor diskutierten Spezialfälle wieder. $k_x = 0$ entspricht dem Fall, dass der Wellenvektor senkrecht zum Magnetfeld steht. Betrachtet man die grüne Linie in a) , so sieht man, dass sie

die Dispersionsrelation viermal schneidet. Die zwei mittleren Schnittpunkte entsprechen dem kleinen Kreis im Querschnitt. Analog ist ersichtlich, dass die grüne Linie für $k_y = 0$ durch das Pseudogap verläuft.
Die blauen Pfeile geben natürlich die Richtung des Spins wieder. Für $k_y = 0$ ist der Spin senkrecht zum Magnetfeld ausgerichtet, während er für $k_x = 0$ parallel oder antiparallel ausgerichtet ist, wie zuvor bereits gezeigt. Auffällig ist, dass der Spin für den äußeren Kreis tangential ausgerichtet ist, wie beim Fall ohne Magnetfeld. Dies lässt sich dadurch begründen, dass der Rashba-Effekt für große $k$ einen größeren Einfluss auf die Energie hat als der Zeeman-Effekt (vgl. allgemeine Energiedispersion). Die Spinpolarisation für den kleinen Kreis ist jedoch nicht mehr tangential. Man kann bereits eine Tendenz erkennen, dass der Spin sich in x- oder -x-Richtung ausrichtet. Dies wird deutlicher, wenn zwei weitere Querschnitte für tiefere Energien gemacht werden.

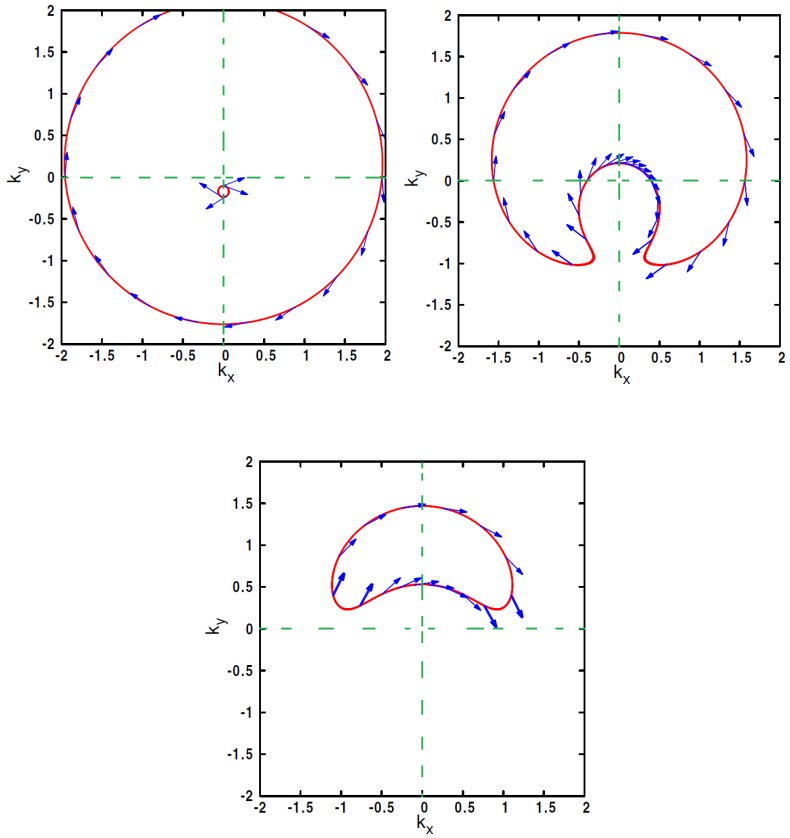



Abbildung 8: Querschnitte der allgemeinen Energiedispersion bei den Energien **a)** $E = 0.9$ **(links oben)**; **b)** $E = 0.3$ **(rechts oben)**; **c)** $E = -0.1$ **(unten)**

Je niedriger die Energie ist, desto kleiner werden die möglichen Wellenvektoren. Dadurch nimmt der Beitrag des Magnetfelds zu und die der Spin-Bahn-Kopplung nimmt ab. Der äußere Kreis wird kleiner, während der innere größer wird und schließlich in den äußeren übergeht. Der Spin zeigt mehr und mehr in x-Richtung. In Abb. c) ist dies deutlich zu erkennen. Eine Ausrichtung in x-Richtung bedeutet, dass er entgegengesetzt

zum Magnetfeld zeigt, was mit den Rechnungen übereinstimmt. Der Spin ist jedoch nicht vollständig parallel/antiparallel polarisiert, da die Spin-Bahn-Kopplung noch einen wesentlichen Beitrag zur Orientierung des Spins liefert.

# 4 Untersuchungen an Gadolinium

Der Rashba-Effekt mit Magnetfeld lässt sich bei Experimenten an Gadolinium beobachten. Gadolinium ist ein Ferromagnet und besitzt mit $Z = 64$ eine hohe Kernladungszahl. Damit liefert die SBK einen im Experiment gut auflösbaren Beitrag zur Energie[7]. 2005 führten O. Krupin et al. unter anderem Untersuchungen an der Grenzschicht zwischen oxidiertem Gadolinium und unoxidiertem durch. Es ist intuitiv, dass sich an Grenzflächen oberflächenähnliche Zustände befinden. Außerdem ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte von Elektronen an Grenzflächen groß. Daher lässt sich hier das Modell des 2DEG anwenden.
Die in Abb. 9 gezeigten Messwerte kommen von einer Messung mit winkelaufgelöster Photoemissionsspektroskopie.

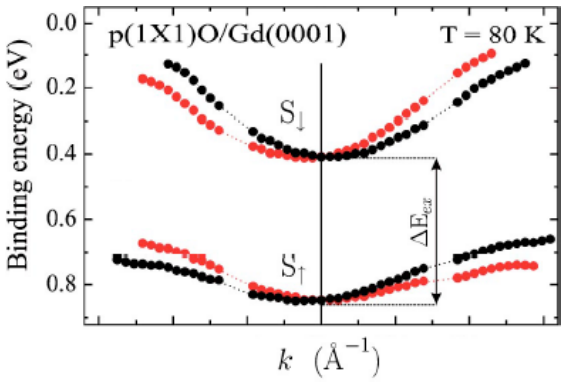



Abbildung 9: Energiedispersion einer Grenzschicht von oxidiertem und unoxidiertem Gadoliniumfilm[7]

Als Ferromagnet können die magnetischen Momente im Gd durch ein äußeres Magnetfeld parallel ausgerichtet werden. Dieses äußere Magnetfeld, welches parallel zur Grenzschicht angelegt wird, wird vor der Messung ausgeschaltet, aber die magnetischen Momente bleiben parallel ausgerichtet. Das Gadolinium/Gadoliniumoxid ist also magnetisiert und bildet ein inneres Magnetfeld aus. Die Gadoliniumschicht ist dünn genug aufgetragen, sodass ihr Magnetfeld die Messung unwesentlich stört. In der Abbildung sind zwei Messreihen für zwei entgegengesetzte Magnetisierungen (rot und schwarz) zur Energiedispersion zu sehen. Insgesamt lassen sich vier Parabeln erahnen. Die Aufspaltung in zwei obere und zwei untere Parabeln kann man als Zeeman-ähnliche Aufspaltung betrachten. Weiterhin sehen wir, dass bei Umkehr der Magnetisierungsrichtung die Minima ungefähr an $k = 0$ gespiegelt sind. Die Parabeln verschiedener Magnetisierungen existieren zwar nicht gleichzeitig, aber man kann diese horizontale Verschiebung der Spin-Bahn-Kopplung zu-

ordnen. Betrachtet man nämlich den Rashba-Term vor seiner Umformung[1]:

$$H_{\text{SBK}} = \frac{\hbar}{2mc^2} \left(\nabla V \times \vec{p}\right) \cdot \vec{S} \,, \tag{28}$$

so sieht man, dass die Umkehrung der Magnetisierung bzw. von $\vec{S}$ zu einem negativen Vorzeichen im SBK-Term führt. Das Gleiche passiert, wenn man den Impuls $\vec{p}$ oder den Wellenvektor $\vec{k}$ umkehrt. Von daher ist die Verschiebung des Minimums durch Ummagnetisierung qualitativ am Rashba-Term zu sehen.
Dass das Modell des 2DEG mit Zeeman-Term das Verhalten der obigen Graphen beschreiben kann, sieht man in Abb. 10. Dort wurde die Energiedispersion der $k_y$-Komponente aufgetragen und anschließend die Magnetisierung umgekehrt. Dabei ist eine zwanzigmal schwächere Spin-Bahn-Kopplung als in den vorherigen Abbildungen gewählt worden. Die durchgezogenen roten Linien im rechten Bild entsprechen beiden Kurven im linken Bild. Die gestrichelten Linien geben die Energiedispersion bei umgekehrtem Magnetfeld an.

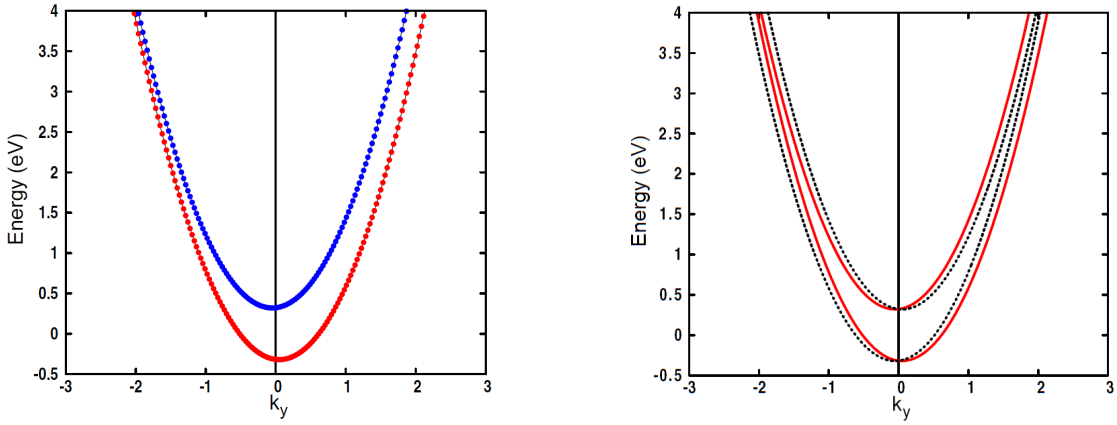


Abbildung 10: Energiedispersion bei schwacher SBK im Magnetfeld

Aufgrund der schwachen SBK besitzt der Spin eher geringe $y$-Anteile. Im Gegensatz zu Abb. 8 c) sind in Abb. 11 zwei Kreise zu sehen, da der Schnitt bei einer Energie gemacht wurde, bei der beide Parabeln geschnitten werden.

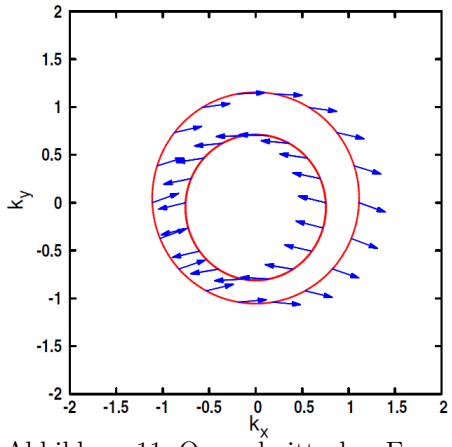


Abbildung 11: Querschnitt der Energiedispersion bei schwacher SBK

# 5 Zusammenfassung

Die Berechnungen zum 2DEG im Magnetfeld haben gezeigt, dass die Energiedispersion $E(\vec{k})$ nicht mehr richtungsunabhängig ist im Gegensatz zum 2DEG ohne Magnetfeld. Auch die Spinpolarisation besitzt eine nicht triviale k-Abhängigkeit.
Die Energiedispersion setzt sich zwar immer noch aus zwei Parabeln zusammen. Diese sind jedoch sowohl horizontal, als auch vertikal gegeneinander verschoben. Ersteres beruht hauptsächlich auf der Spin-Bahn-Kopplung und Letzteres auf dem Zeeman-Effekt. Abhängig von der Stärke des Magnetfelds bildet sich außerdem eine Pseudolücke aus. Für verhältnismäßig große Energien ist der Spin nahezu senkrecht zum Wellenvektor ausgerichtet, wie beim 2DEG ohne Magnetfeld. Bei niedrigeren Energien jedoch richtet sich der Spin im Wesentlichen antiparallel oder parallel zum Magnetfeld aus, je nachdem, welches Band in der Energiedispersion betrachtet wird.
Tatsächlich lässt sich der Rashba-Effekt auch an ferromagnetischen Oberflächen beobachten. Er ist jedoch beispielsweise bei der betrachteten Gadolinium-Grenzschicht relativ schwach, wodurch der Spin nur geringfügig von der parallelen bzw. antiparallelen Ausrichtung zum Magnetfeld abweicht.

# 6 Literaturverzeichnis


[1] T. Frohoff-Hülsmann. *Spin-Bahn Kopplung an Festkörperoberflächen: Rashba-Effekt.* Ausarbeitung des Vortrags im Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und Kondensierten Materie. WWU Münster, WS 2014/15.

[2] G. Münster. *Quantentheorie.* De Gruyter, 2010.

[3] W. Demtröder. *Experimentalphysik 3.* Springer, 2010.

[4] P. Streda und P. Seba. "Antisymmetric Spin Filtering in One-Dimensional Electron Systems in Uniform Spin-Orbit Coupling". In: *Physical Review Letters* 90.25 (2003).

[5] B. Wallmeyer. *Theorie der Spin-Bahn-Wechselwirkung in Festkörpern und an Oberflächen.* Vortrag im Seminar zu aktuellen Problemen dimensionsreduzierter Festkörper. WWU Münster, SS 2013.

[6] Von Herrn Prof. Dr. P. Krüger bereitgestellte Abbildungen; Abb. 3,4,6,8,10,11.

[7] O. et al. Krupin. "Rashba effect at magnetic metal surfaces". In: *Physical Review Letters* 71.201403 (2005).

# 7 Anhang

**Auswirkungen der Einzelnen Terme im Hamiltonian auf die Wellenfunktion**

$\psi_{\text{Ort}}$ ist der Ortsanteil der Wellenfunktion.

$$p^2\psi(\vec{r}) = -\hbar^2\Delta\psi(\vec{r}) = \hbar^2k^2\psi(\vec{r}) = \hbar^2k^2\psi_{\text{Ort}}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \qquad k^2 = k_x^2 + k_y^2$$

$$p_y\sigma_x\psi = -i\hbar(ik_y)\frac{1}{2\pi}e^{i\vec{k}\vec{r}}\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \hbar k_y\psi_{\text{Ort}}\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$

$$p_x\sigma_y\psi = i\hbar k_x\psi_{\text{Ort}}\begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix}$$

$$\vec{B}\vec{\sigma} = B_x\sigma_x + B_y\sigma_y \qquad \vec{B}\vec{\sigma}\psi = B_x\psi_{\text{Ort}}\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} + iB_y\psi_{\text{Ort}}\begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix}$$