Спин-орбитальное смешивание в полупроводниках $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ в Γ-точке

© В.Д. Дымников, О.В. Константинов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Dymnik@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 10 июня 2008 г.)

В рамках пятизонной модели впервые проанализированы следствия теории спин-орбитального смешивания в полупроводниках A_3B_5 в Г-точке. Установлена формула для оптического матричного элемента, связывающего зоны Γ_7 и Γ_8, выражающая его через известный параметр Латтинжера q. До сих пор считалось, что этот оптический матричный элемент равен нулю, а переход запрещен. Обсуждается роль такого перехода в эксперименте по поглощению фотонов свободными дырками в p-GaSb.

PACS: 72.25.-b, 72.25.Dc, 81.05.Ea

1. Введение

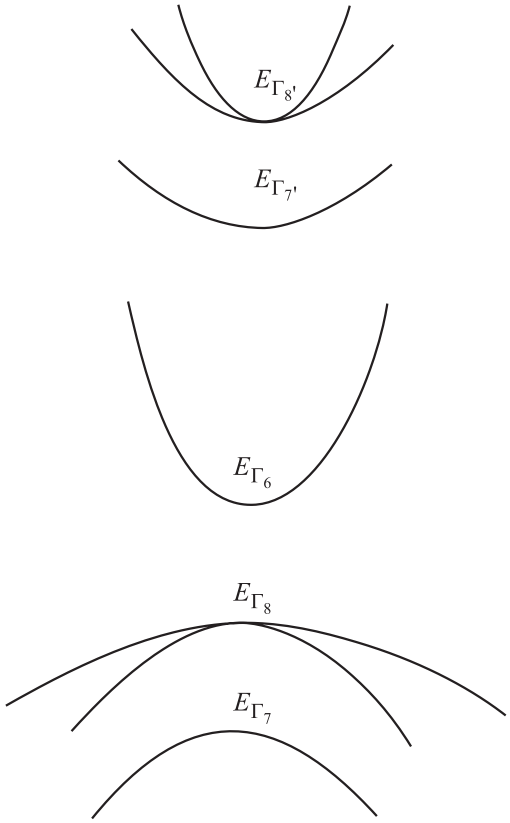
Спиновые явления в полупроводниках в настоящее время играют исключительно важную роль в полупроводниковой наноэлектронике [1]. На основе этих явлений создано новое научное направление, называемое спинтроникой [2]. Поэтому представляется актуальным получение любой новой дополнительной информации о спиновых взаимодействиях в полупроводниках.

Настоящая работа посвящена малоизученному физическому явлению — эффекту спин-орбитального смешивания в полупроводниках тетраэдрической симметрии $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ в центре зоны Бриллюэна. Обычно при изучении спин-орбитального взаимодействия в полупроводниках в центре зоны Бриллюэна его роль сводят к расщеплению энергетических уровней в Г-точке. Однако спин-орбитальное взаимодействие в $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ проявляется и в смешивании различных по симметрии координатных волновых функций электрона в Г-точке [3]. На последнее обстоятельство обычно не обращают внимания, полагая его роль пренебрежимо малой, и именно на этом предположении строится широко используемая зонная модель Кейна [4]. Однако имеются ситуации, когда смешивание волновых функций играет определяющую роль. К их числу, например, относятся „запрещенные“ [5] оптические переходы $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ внутри валентной зоны и формирование существенно релятивистского параметра Латинжера q [6,7]. „Запрет“ на оптический переход $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ в $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ следует из модели Кейна, не учитывающей спин-орбитального смешивания, хотя по симметрии этот переход разрешен. Экспериментальные данные работы [8], в которой изучалось оптическое поглощение не свободных дырках в p-GaAs, и теоретический анализ, проведенный в [9], указывают на возможную роль спин-орбитального смешивания в этом материале при переходах $\Gamma_7 \to \Gamma_8$. Недавние исследования поперечного g-фактора ($g_\perp$) тяжелых дырок в квантовой яме GaAs/AlGaAs (001) [10] показали, что измеряемая величина $g_\perp$ непосредственно связана с параметром Латинжера q, характеризующим объемные свойства GaAs и имеющим релятивистскую природу [7]. Удовлетворительного согласия с экспериментом в [10] удалось достичь только путем выхода за рамки модели Кейна и учета спин-орбитального смешивания.

Отмеченные выше экспериментальные факты послужили для авторов настоящей работы побудительным мотивом для более полного изучения явления спин-орбитального смешивания в полупроводниках $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$, которое проводится с помощью нового подхода, разработанного авторами в [11,12]. Суть этого подхода заключается в том, что все оптические матричные элементы в Г-точке и представление о многозонной энергетической схеме в $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ в Г-точке удается связать с экспериментально наблюдаемыми величинами (эффективными массами и g-факторами электронов). По этой причине вся информация о спин-орбитальном смешивании, полученная в настоящей публикации, опирается на известные экспериментальные данные.

2. Модель пяти зон

При исследовании спин-орбитального смешивания в материалах без центра инверсии $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ мы будем пользоваться моделью зон в Г-точке, представленной на рисунке. На этом рисунке обозначены валентные зоны Γ_7, Γ_8. С уходом от Г-точки зона Γ_8 расщепляется на подзоны тяжелых и легких дырок. Зона Γ_6 — зона проводимости. Зоны $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{8'}$ — возбужденные зоны проводимости. Зона $\Gamma_{8'}$ с удалением от центра зоны Бриллюэна расщепляется на две подзоны аналогично тому, как это происходит в валентной зоне. Зонная схема, приведенная на рисунке, является общепринятой многозонной моделью для соединений $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ [13]. Принято считать, что зоны $\Gamma_7, \Gamma_8, \Gamma_{7'}, \Gamma_{8'}$ формируются из координатных функций представления Γ_4, т. е. описываются волновыми функциями p-типа, а зона Γ_6 связана с представлением Γ_1, т. е. описывается волновой функцией s-типа [13]. Пространственная симметрия состояний в модели пяти зон анализировалась в работе [12], и там было показано, что она хорошо согласуется с известными экспериментальными данными (эффективными массами и g-факторами



Модель пяти зон для полупроводников $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ в Г-точке.

электронов), т. е. находит экспериментальное подтверждение. Энергии состояний в Г-точке будем обозначать символами E_{Γ_n} $(n = 1, 7, 8, 7', 8')$, где символ Γ_n соответствует определенной зоне. $E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8} = E_0$ — ширина запрещенной зоны, $E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7} = \Delta_0$, $E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_{7'}} = \Delta'_0$, Δ_0, Δ'_0 — энергии спин-орбитального расщепления. Здесь мы выпишем волновые функции зон, с которыми будем иметь дело в дальнейшем. Волновые функции в зоне Γ_7 описывают двукратно вырожденные состояния, и их можно записать в виде

$$|\Gamma_7; M\rangle = |\Gamma_7(\Gamma_4); M\rangle, \quad M = \pm\frac{1}{2}, \tag{1}$$

где

$$\left|\Gamma_7(\Gamma_4); \frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left[(x+iy)\beta + z\alpha\right],$$

$$\left|\Gamma_7(\Gamma_4); -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[z\beta - (x-iy)\alpha\right]. \tag{2}$$

В формулах (2) x, y, z — орбитальные гармоники p-типа, α, β — спиновые функции $\binom{1}{0}$, $\binom{0}{1}$ соответственно.

Состояния в зоне Γ_8 четырехкратно вырождены, и их волновые функции будем записывать следующим образом:

$$|\Gamma_8; M\rangle = |\Gamma_8(\Gamma_4); M\rangle, \quad M = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}, \tag{3}$$

где

$$\left.\begin{aligned}
\left|\Gamma_8(\Gamma_4); \frac{3}{2}\right\rangle &= -(x+iy)\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\\
\left|\Gamma_8(\Gamma_4); \frac{1}{2}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left[-(x+iy)\frac{\beta}{\sqrt{2}} + \sqrt{2}z\alpha\right]\\
\left|\Gamma_8(\Gamma_4); -\frac{1}{2}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left[(x-iy)\frac{\alpha}{\sqrt{2}} + \sqrt{2}z\beta\right]\\
\left|\Gamma_8(\Gamma_4); -\frac{3}{2}\right\rangle &= (x-iy)\frac{\beta}{\sqrt{2}}
\end{aligned}\right\}. \tag{4}$$

Обозначения здесь те же, что и в (2).

Волновые функции зоны $\Gamma_{7'}$ соответствуют двукратно вырожденным состояниям. Они будут обозначаться символами

$$|\Gamma_{7'}; M\rangle = |\Gamma_{7'}(\Gamma_{4'}); M\rangle, \quad M = \pm\frac{1}{2}. \tag{5}$$

Функции $\left|\Gamma_{7'}(\Gamma_{4'}); \frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|\Gamma_{7'}(\Gamma_{4'}); -\frac{1}{2}\right\rangle$ дается формулами (2), если заменить в последних $x \to x'$, $y \to y'$, $z \to z'$.

В зоне $\Gamma_{8'}$ волновые функции описывают четырехкратно вырожденные состояния, они обозначаются символами

$$|\Gamma_{8'}; M\rangle = |\Gamma_{8'}(\Gamma_{4'}); M\rangle, \quad M = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \tag{6}$$

где функции $|\Gamma_{8'}(\Gamma_{4'}); M\rangle$ даются выражениями (3), (4), если заменить в последних $x \to x'$, $y \to y'$, $z \to z'$. В выражениях (5), (6) x', y', z' — p-гармоники, связанные с представлением $\Gamma_{4'}$. Из соображения удобства мы ввели для одного представления символы Γ_4 и $\Gamma_{4'}$ подобно тому, как введены обозначения $\Gamma_{8'}$, $\Gamma_{7'}$, Γ_8, Γ_7.

3. Спин-орбитальное смешивание

Для описания эффектов, связанных со спин-орбитальным смешиванием, мы будем пользоваться моделью пяти зон, изображенной на рисунке. Как показано в работе [12], из экспериментальных фактов следует, что зоны Γ_7, Γ_8, $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{8'}$ формируются в основном из волновых функций p-типа. Эти зоны возникли в результате спин-орбитального расщепления состояния $|\Gamma_{4'}\rangle$ в зоне проводимости и состояния $|\Gamma_4\rangle$ — в валентной зоне. С другой стороны, тетраэдрическая симметрия позволяет спин-орбитальному взаимодействию не только расщеплять орбитальные состояния $|\Gamma_{4'}\rangle$ и $|\Gamma_4\rangle$, но и смешивать их. Последнее обстоятельство приводит к тому, что в рамках рассматриваемой модели спин-орбитальное взаимодействие формирует смешанные состояния в валентной зоне и зоне проводимости, которые должны описываться волновыми функциями вида

$$\left.\begin{aligned} &|\Gamma_8; M\rangle = C_{\Gamma_8\Gamma_4}|\Gamma_8(\Gamma_4); M\rangle + C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}}|\Gamma_{8'}(\Gamma_{4'}); M\rangle,\\ &M = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\\ &|\Gamma_7; M\rangle = C_{\Gamma_7\Gamma_4}|\Gamma_7(\Gamma_4); M\rangle + C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}}|\Gamma_{7'}(\Gamma_{4'}); M\rangle,\\ &M = \pm\frac{1}{2} \end{aligned}\right\}, \quad (7)$$

$$\left.\begin{aligned} &|\Gamma_{8'}; M\rangle = C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}}|\Gamma_{8'}(\Gamma_{4'}); M\rangle + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4}|\Gamma_8(\Gamma_4); M\rangle,\\ &M = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\\ &|\Gamma_{7'}; M\rangle = C_{\Gamma_{7'}\Gamma_{4'}}|\Gamma_{7'}(\Gamma_{4'}); M\rangle + C_{\Gamma_{7'}\Gamma_4}|\Gamma_7(\Gamma_4); M\rangle,\\ &M = \pm\frac{1}{2} \end{aligned}\right\}. \quad (8)$$

Волновые функции (7) относятся к валентной зоне, а волновые функции (8) описывают возбужденные состояния в зоне проводимости. Волновые функции (7), (8) получаются в результате диагонализации гамильтониана задачи, включающего спин-орбитальное взаимодействие

$$H_{s0} = \frac{\hbar}{4m^2c^2}\,\sigma(\nabla V \times \mathbf{p}), \quad (9)$$

на базисных функциях

$$|\Gamma_7(\Gamma_4); M\rangle \quad \text{и} \quad |\Gamma_{7'}(\Gamma_{4'}); M\rangle;$$

$$|\Gamma_8(\Gamma_4); M\rangle \quad \text{и} \quad |\Gamma_{8'}(\Gamma_{4'}); M\rangle. \quad (10)$$

Тогда смешивание функций, описывающих разные состояния $\Gamma_{4'}$ и Γ_4, будет обусловлено отличной от нуля недиагональной частью оператора (9)

$$\langle\Gamma_8(\Gamma_4); M|H_{s0}|\Gamma_{8'}(\Gamma_{4'}); M'\rangle = \frac{1}{3}\,\Delta^-\delta_{MM'}, \quad (11)$$

$$\langle\Gamma_7(\Gamma_4); M|H_{s0}|\Gamma_{7'}(\Gamma_{4'}); M'\rangle = -\frac{2}{3}\,\Delta^-\delta_{MM'}, \quad (12)$$

$$\Delta^- = i\,\frac{3\hbar}{4m^2c^2}\left\langle x\,\middle|\,\frac{\partial V}{\partial x}\,p_y - \frac{\partial V}{\partial y}\,p_x\,\middle|\,y'\right\rangle. \quad (13)$$

В формулах (9)–(13) $\frac{1}{2}\sigma$ — оператор спина $\frac{1}{2}$, V — кристаллический потенциал, $\mathbf{p}$ — оператор импульса, m — масса электрона, c — скорость света, $\delta_{MM'}$ — символ Кронекера.

Диагонализация гамильтониана в рассматриваемой нами модели приводит к следующему результату:

$$C_{\Gamma_8\Gamma_4} = C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}} = \sqrt{\frac{1+\sqrt{1-4\delta_1^2}}{2}}, \quad (14)$$

$$C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4} = -C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}} = \frac{\delta_1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1-4\delta_1^2}\right)}}, \quad (15)$$

$$C_{\Gamma_7\Gamma_4} = C_{\Gamma_{7'}\Gamma_{4'}} = \sqrt{\frac{1+\sqrt{1-4\delta_2^2}}{2}}, \quad (16)$$

$$C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}} = -C_{\Gamma_{7'}\Gamma_4} = \frac{\delta_2}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1-4\delta_2^2}\right)}}, \quad (17)$$

$$\delta_1 = \frac{1}{3}\,\frac{\Delta^-}{(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})}, \quad \delta_2 = \frac{2}{3}\,\frac{\Delta^-}{(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7})}. \quad (18)$$

Вещественность коэффициентов смешивания (14)–(17) связана с выбором фаз в функциях (2), (4).

4. Оптический матричный элемент, ответственный за „запрещенный" переход $\Gamma_7 \to \Gamma_8$

Полученные в разделе 3 результаты позволяют вычислить оптический матричный элемент, соответствующий переходу $\Gamma_7 \to \Gamma_8$. В работе [14] было сформулировано правило отбора для обобщенного оператора импульса π

$$\pi = \mathbf{p} + \mu(\sigma \times \nabla V), \quad \mu = \frac{\hbar}{4mc^2} \quad (19)$$

между состояниями $|\Gamma_7; M_1\rangle$ и $|\Gamma_8; M_2\rangle$:

$$\langle\Gamma_7; M_1|\mathbf{k}\pi|\Gamma_8; M_2\rangle = \Bigg[-\sqrt{\frac{10}{3}}\,k_{+1}C^{\frac{1}{2}\,M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2 21} + \sqrt{\frac{5}{3}}\,k_0\left(C^{\frac{1}{2}\,M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2 2-2} - C^{\frac{1}{2}\,M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2 22}\right) + \sqrt{\frac{10}{3}}k_{-1}C^{\frac{1}{2}\,M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2 2-1}\Bigg]C^{\Gamma_7\Gamma_8}, \quad (20)$$

где

$$M_1 = \pm\frac{1}{2}, \quad M_2 = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}.$$

В формуле (20) k_α ($\alpha = 0, \pm 1$) — циклические компоненты вектора квазиимпульса $\mathbf{k}$, $C^{JM}_{j_1m_1j_2m_2}$ — коэффициенты Клебша–Гордана, $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ — приведенный матричный элемент. Вывод правила отбора (20) приведен в [11], там же в явном виде получено выражение для элемента $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$. Применительно к нашей ситуации, когда волновые функции в валентной зоне описываются выражениями (7), приведенный матричный элемент записывается в виде

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = (C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}}C_{\Gamma_8\Gamma_4} - C_{\Gamma_7\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}})Q', \quad (21)$$

где

$$Q' = -i\langle x|p_y|z'\rangle + \mu\left\langle x\,\middle|\,\frac{\partial V}{\partial y}\,\middle|\,z'\right\rangle. \quad (22)$$

Подставляя в (21) выражения коэффициентов смешивания (14)–(18), получаем окончательно

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = \frac{\Delta^- Q' F}{\sqrt{(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7})}}, \quad (23)$$

где

$$F = \left(\frac{1}{3}f + \frac{2}{3f}\right), \quad f = \sqrt{2\frac{\delta_1}{\delta_2}\frac{1+\sqrt{1-4\delta_2^2}}{1+\sqrt{1-4\delta_1^2}}}. \tag{24}$$

Выражение (23) является строгим результатом для приведенного матричного элемента в рассматриваемой модели. Учитывая, что второе релятивистское слагаемое в (22) много меньше первого слагаемого и величина F близка к единице, можно с хорошей точностью считать

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = \frac{Q\Delta^-}{\sqrt{(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7})}}, \tag{25}$$

где

$$Q = -i\langle x|p_y|z'\rangle. \tag{26}$$

5. Связь матричного элемента $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ с параметром Латинжера q

В этом разделе мы установим связь матричного элемента $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ с экспериментально наблюдаемыми величинами. В работах [9,11] были сформулированы правила для оператора импульса и выведены правила сумм для приведенных оптических матричных элементов в Г-точке в $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ с полным учетом тетраэдрической симметрии и спин-орбитального взаимодействия. Эти правила сумм связывают оптические матричные элементы с экспериментально наблюдаемыми величинами (эффективными массами и g-факторами). В работах [9,12] было показано, что эти правила сумм позволяют количественно оценивать важные матричные элементы и дают информацию о пространственной симметрии ближайших по энергии возбужденных состояний. Как показано далее, эти правила сумм позволяют связать матричный элемент $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ с экспериментально наблюдаемыми величинами. Для наших целей важны суммы, которые выражаются через приведенные матричные элементы, связывающие зоны Γ_7 и Γ_8, Γ_8 и $\Gamma_{8'}$. Первый матричный элемент есть $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$, и он определяется правилами отбора (20). Матричные элементы, ответственные за переходы $\Gamma_8 \to \Gamma_{8'}$, определяются правилами отбора [11]

$$\langle\Gamma_8; M|\mathbf{k}\pi|\Gamma_{8'}; M'\rangle = \frac{1}{3}D_S^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}(I^S)_{MM''} + \frac{1}{3}D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}(I^A)_{MM'},$$

$$M, M' = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}. \tag{27}$$

Здесь I^S — эрмитова матрица 4×4, а I^A — антиэрмитова матрица 4×4. Эти матрицы можно записать через матрицы J_x, J_y, J_z момента $J = \frac{3}{2}$

$$I^S = k_x\{J_x, J_y^2 - J_z^2\} + k_y\{J_y, J_z^2 - J_x^2\} + k_z\{J_z, J_x^2 - J_y^2\}, \tag{28}$$

$$I^A = i[k_x\{J_y, J_z\} + k_y\{J_z, J_x\} + k_z\{J_x, J_y\}]. \tag{29}$$

В формулах (28), (29) символ $\{\ldots\}$ означает антикоммутатор: $\{A, B\} = AB + BA$. Явный вид матриц J_x, J_y, J_z, а вместе с ними и I^S, I^A приведены в работе [11]. В формуле (27) $D_S^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$, $D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$ — приведенные матричные элементы, удовлетворяющие условиям

$$D_S^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = D_S^{\Gamma_{8'}\Gamma_8}, \quad D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = -D_A^{\Gamma_{8'}\Gamma_8}. \tag{30}$$

В явном виде эти элементы представлены в [11].

Через названные выше приведенные матричные элементы выражаются суммы C_{Γ_8}, $D_{\Gamma_8}^{(1)}$, $D_{\Gamma_8}^{(2)}$, $D_{\Gamma_8}^{(3)}$, которые связывают зону Γ_8 со всеми зонами представления Γ_7 и со всеми другими зонами того же представления $\Gamma_{8'}$

$$C_{\Gamma_8} = \frac{1}{m}\sum_{\Gamma_7}\frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7}}, \tag{31}$$

$$D_{\Gamma_8}^{(1)} = \frac{1}{m}\sum_{\Gamma_{8'}}\frac{(D_S^{\Gamma_8\Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}}},$$

$$D_{\Gamma_8}^{(2)} = \frac{1}{m}\sum_{\Gamma_{8'}}\frac{(D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}}},$$

$$D_{\Gamma_8}^{(3)} = \frac{1}{m}\sum_{\Gamma_{8'}}\frac{D_S^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}}}, \tag{32}$$

где m — масса электрона.

Введенные суммы (31), (32) входят в число сумм, через которые выражаются параметры Латинжера зоны Γ_8. В настоящей работе нас интересуют только суммы (31), (32), через которые выражается параметр q. В модели зон, в которой волновые функции зоны Γ_8 формируются из координатных функций p-типа, выражение для q имеет вид [9]

$$q = -\frac{4}{9}C_{\Gamma_8} - \frac{2}{9}D_{\Gamma_8}^{(1)} + \frac{4}{9}D_{\Gamma_8}^{(2)} + \frac{2}{9}D_{\Gamma_8}^{(3)}. \tag{33}$$

Выражение (33) допускает упрощение в случае произвольной многозонной модели, обобщающей модель пяти зон, в которой зоны $\Gamma_{8'}$, $\Gamma_{7'}$, Γ_8, Γ_7 устроены так же, как в пятизонной модели, а остальные зоны описываются волновыми функциями, сформированными из координатных функций конкретных пространственных представлений Γ_α ($\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$). Используя явные выражения приведенных матричных элементов из работы [11], волновые функции состояний в зонах $\Gamma_7, \Gamma_8, \Gamma_{7'}, \Gamma_{8'}$, соотношение (33) можно записать в виде

$$q = -\frac{4}{9}\frac{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7}}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}}\frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{m\Delta_0} + \frac{4}{9}\frac{\Delta_0' Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})} + \frac{4}{9}\sum_{\Gamma_{4''}}\frac{\Delta_0''(i\langle x_{\Gamma_8}|p_y|z''\rangle)^2}{m(E_{\Gamma_{8''}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7''}} - E_{\Gamma_8})}. \tag{34}$$

В формуле (34) первые два слагаемых в правой части соответствуют взаимодействию зоны Γ_8 с зонами $\Gamma_{7'}, \Gamma_{8'}$. Третье слагаемое в (34) описывает взаимодействие зоны Γ_8 с более высокими возбужденными зонами $\Gamma_{7''}, \Gamma_{8''}$, произошедшими в результате спин-орбитального расщепления от энергии состояния, относящегося к представлению $\Gamma_{4''}$, т.е. описывающегося волновыми функциями p-типа x'', y'', z''. Величина $\Delta_0'' = E_{\Gamma_{8''}} - E_{\Gamma_{7''}}$ характеризует спин-орбитальное расщепление зоны $\Gamma_{4''}$. В формуле (34) под выражением $|x_{\Gamma_8}\rangle$ понимается выражение

$$|x_{\Gamma_8}\rangle = C_{\Gamma_8\Gamma_4}|x\rangle + C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}}|x'\rangle. \quad (35)$$

Вывод формулы (34) дан в Приложении. Из выражения (34) видно, что параметр Латинжера q является релятивистским и в рассматриваемой бесконечнозонной модели формируется исключительно за счет взаимодействия зоны Γ_8 с зонами представлений Γ_7, Γ_8, координатные волновые функции которых есть функции p-типа.

В модели пяти зон можно пренебречь третьим слагаемым в правой части (34) и, подставляя (23) с матричным элементом (26), получить выражение

$$q = \frac{4}{9}\,\frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})}\left(\Delta_0' - \frac{(\Delta^-)^2F^2}{\Delta_0}\right). \quad (36)$$

Выражение (36) за счет множителя F^2 является более точным, чем то, которое было получено в [10]. Из соотношения (34) следует выражение для матричного элемента $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$

$$\frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{m\Delta_0} = \frac{9}{4}\,\frac{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7}}\,(q_0 - q), \quad (37)$$

$$q_0 = \frac{4}{9}\,\frac{\Delta_0' Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})}. \quad (38)$$

Выражение (38) в первом порядке по спин-орбитальному взаимодействию в теории возмущений совпадает с выражением для параметра q, полученным в [7]. Авторы [7] не учитывали спин-орбитальное смешивание. Ранее в работе [12] мы, опираясь на правила сумм [9,11], показали, что для ряда полупроводников $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$

$$\frac{Q^2}{(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})} \cong \frac{1}{4}(\gamma_1 - 2\gamma_2 + 3\gamma_3) - \frac{3}{4}k - \frac{51}{16}q. \quad (39)$$

Здесь $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, k, q — параметры Латинжера [6]. С другой стороны, величины Δ_0, Δ_0' как и энергии всех состояний, фигурирующих в (37), известны (см., например, [15]). Поэтому соотношение (37) можно считать выражением матричного элемента $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ через экспериментально наблюдаемые величины. Видно, что элемент $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ определяется вкладом в параметр q, формируемым исключительно спин-орбитальным смешиванием.

6. Коэффициент поглощения для оптических переходов $\Gamma_7 \to \Gamma_8$

Важным элементом новизны настоящей работы является тот факт, что рассмотрение зонной структуры полупроводников $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$ с учетом спин-орбитального смешивания позволяет вычислить коэффициент поглощения излучения внутри валентной зоны для оптических переходов $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ вблизи Γ-точки. Как отмечалось выше, такие переходы в Γ-точке считаются запрещенными и в оптических исследованиях не учитываются. В работе [9] было отмечено, что в ряду материалов, в которых спин-орбитальное смешивание может проявляться в большей степени, находится GaSb, и именно в этом материале наблюдалось аномальное большое поглощение излучения на свободных дырках [8]. Этот эксперимент теоретически не интерпретировался, и он привлек наше внимание, поскольку может иметь отношение к обсуждаемой теме. Мы попытаемся понять результаты работы [8] с позиции спин-орбитального смешивания.

Далее мы рассматриваем ситуацию, связанную с вырожденным материалом p-типа $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$, когда уровень Ферми проходит ниже потолка валентной зоны и возможны прямые переходы из спин-отщепленной подзоны в подзоны легких и тяжелых дырок. Именно такая ситуация реализовалась в работе [8], в которой изучалось поглощение излучения в материале p-GaSb. Мы предполагаем, что дырки в зоне Γ_8 свободны и полностью вырождены, а в зоне Γ_7 они отсутствуют. В акте поглощения кванта света уничтожается свободная дырка a в зоне Γ_8 и рождается новая дырка в зоне Γ_7, или электрон переходит из зоны Γ_7 на свободное место в зоне Γ_8. При вычислении мы используем сферическую модель валентной зоны ($\gamma_2 = \gamma_3$). Соответствующие волновые функции приведены в [4]. Производя вычисления по стандартной схеме [16] с использованием правил отбора (20), можно получить следующие результаты для коэффициентов поглощения в дипольном приближении.

При переходах из спин-отщепленной зоны в зону тяжелых дырок (переходы $s \to h$) коэффициент поглощения $\alpha_{s\to h}$ равен

$$\alpha_{s\to h} = \frac{4\sqrt{2}}{3}\,\frac{e^2}{\hbar^2 cn}\,\frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{\sqrt{m\Delta_0}}\left(\frac{\mu_{sh}}{m}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{\Delta_0}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\Delta_0} - 1}. \quad (40)$$

Здесь и далее мы пренебрегаем линейным по $\mathbf{k}$ расщеплением зоны Γ_8. Плотность состояний в зоне Γ_8 предполагается соответствующей квадратичному по $\mathbf{k}$ спектру, на что указывает эксперимент [17]. При переходах из спин-отщепленной зоны в зону легких дырок (переходы $s \to l$) коэффициент поглощения $\alpha_{s\to l}$ дается выражением (40) с заменой

$$(\mu_{sh})^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\Delta_0} - 1} \to (\mu_{sl})^{\frac{3}{2}}\sqrt{1 - \frac{\hbar\omega}{\Delta_0}}. \quad (41)$$

В формулах (40), (41) e — заряд электрона, c — скорость света, n — показатель преломления, ω — частота света накачки,

$$\mu_{sh} = \frac{m_s m_h}{m_h - m_s}, \quad \mu_{sl} = \frac{m_s m_l}{m_s - m_l}, \tag{42}$$

m_h, m_l, m_s — эффективные массы тяжелых, легких и отщепленных дырок. При выводе формул для $\alpha_{s\to h}$ и $\alpha_{s\to l}$ подразумевалось выполнение неравенств для эффективных масс дырок: $m_l < m_s < m_h$.

В работе [8] наблюдалось сильное поглощение ($\alpha \approx 2\cdot 10^3\,\mathrm{cm}^{-1}$), сравнимое с собственным, в области частот, примыкающей к краю фундаментального поглощения в сильно легированном материале p-GaSb ($N_a \approx 3\cdot 10^{19}\,\mathrm{cm}^{-3}$). Было установлено, что эти частоты соответствуют переходам $s \to h$. Оценки показывают, что наблюдаемые значения и частотная зависимость коэффициента поглощения в [8] в области спектра, примыкающей к полосе фундаментального поглощения, не могут быть объяснены по стандартной схеме [16] с помощью одних только линейных по $\mathbf{k}$ членов в оптическом матричном элементе. В связи с этим представляет интерес экспериментальная оценка параметра $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ по результатам работы [8], если предположить, что соответствующие участки спектра формируются прямыми переходами $s \to h$, для которых коэффициент поглощения $\alpha_{s\to h}$ дается выражением (40). Анализ показывает, что частотная зависимость коэффициента поглощения в длинноволновой части спектра, примыкающего к полосе фундаментального поглощения ($0.78 < \hbar\omega < 0.85\,\mathrm{eV}$), удовлетворительно описывается формулой (40), если принять в ней безразмерный параметр $\frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{m\Delta_0} = 0.3$. В модели пяти зон этому значению соответствует матричный элемент $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ (25) с параметром смешивания $\Delta^- = 0.6\,\mathrm{eV}$. Оценки производились при значениях параметров $n = 3.96$, $m_h = 0.32m$, $m_s = 0.15m$. Значения других величин взяты из [9]. Существующая в литературе наиболее близкая к эксперименту теоретическая оценка параметра Δ^- для GaSb равна $0.4\,\mathrm{eV}$ [18]. Близость двух оценок свидетельствует о том, что переходы $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ при $k \to 0$ в p-GaSb нельзя считать заведомо пренебрежимо малыми, и их нельзя относить к разряду запрещенных. Мы не углубляемся дальше в ситуацию с экспериментом, описанным в [8], поскольку его детальному анализу будет посвящена отдельная работа. Будущие исследования оптических переходов $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ должны установить статус этих переходов для $A^{\mathrm{III}}B^{\mathrm{V}}$.

Приложение

При выводе выражения (34) мы исходим из соотношения (33), в котором в правой части стоят суммы, составленные из приведенных матричных элементов. Сумма C_{Γ_8} характеризует связь зоны Γ_8 со всеми другими зонами представления Γ_7

$$C_{\Gamma_8} = \frac{1}{m}\sum_{\Gamma_7}\frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7}}$$

$$= \frac{1}{m}\frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7}} + \frac{1}{m}\frac{(C^{\Gamma_{7'}\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{7'}}} + \frac{1}{m}\sum_{\Gamma_{7''}}\frac{(C^{\Gamma_{7''}\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{7''}}}. \tag{П1}$$

Здесь первые два слагаемых соответствуют взаимодействию зоны Γ_8 с валентной зоной Γ_7 и зоной проводимости $\Gamma_{7'}$. Третье слагаемое учитывает взаимодействие зоны Γ_8 со всеми выше расположенными зонами проводимости $\Gamma_{7''}$. Поскольку в нашей модели зона Γ_8 характеризуется волновой функцией p-типа, все матричные элементы в (П1) связывают волновые функции зоны Γ_8 с функциями других зон, сформированных только из координатных функций представления Γ_4 [11]

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = i\langle x_{\Gamma_7}|p_y|z_{\Gamma_8}\rangle, \tag{П2}$$

$$C^{\Gamma_{7'}\Gamma_8} = i\langle x_{\Gamma_{7'}}|p_y|z_{\Gamma_8}\rangle, \tag{П3}$$

$$C^{\Gamma_{7''}\Gamma_8} = i\langle x''|p_y|z_{\Gamma_8}\rangle. \tag{П4}$$

Здесь x_{Γ_7}, $x_{\Gamma_{7'}}$, x'' — орбитальные гармоники, описывающие зоны Γ_7, $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{7''}$ соответственно, z_{Γ_8} — орбитальная гармоника, описывающая зону Γ_8. В формулах (П2)–(П4) отброшены малые релятивистские слагаемые, содержащие μ.

В соответствии с нашей моделью

$$|x_{\Gamma_7}\rangle = C_{\Gamma_7\Gamma_4}|x\rangle + C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}}|x'\rangle, \tag{П5}$$

$$|x_{\Gamma_{7'}}\rangle = C_{\Gamma_{7'}\Gamma_4}|x\rangle + C_{\Gamma_{7'}\Gamma_{4'}}|x'\rangle, \tag{П6}$$

$$|x_{\Gamma_8}\rangle = C_{\Gamma_8\Gamma_4}|x\rangle + C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}}|x'\rangle. \tag{П7}$$

Матричный элемент (П2) дается формулой (21) с матричным элементом Q (26) вместо Q' (22). Матричный элемент (П3) легко вычисляется с помощью (П6), (П7)

$$i\langle x_{\Gamma_{7'}}|p_y|z_{\Gamma_8}\rangle = (C_{\Gamma_{7'}\Gamma_{4'}}C_{\Gamma_8\Gamma_4} - C_{\Gamma_{7'}\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}})Q. \tag{П8}$$

Из формул (21), (П8), (14)–(17) и нормировки волновых функций следует, что

$$(C^{\Gamma_{7'}\Gamma_8})^2 + (C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2 = Q^2. \tag{П9}$$

Подставляя (П9) в (П1), получаем выражение для суммы C_{Γ_8}

$$C_{\Gamma_8} = \frac{(C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{m\Delta_0}\,\frac{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7}}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}} - \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})}$$

$$-\sum_{\Gamma_{7'}}\frac{(i\langle x''|p_y|z_{\Gamma_8}\rangle)^2}{m(E_{\Gamma_{7''}} - E_{\Gamma_8})}. \tag{П10}$$

Суммы, связывающие зону Γ_8 со всеми другими зонами того же представления, в рассматриваемой нами модели, в которой каждая зона относится к конкретному координатному представлению, могут быть записаны следующим образом [11], [9], [12]:

$$D_{\Gamma_8}^{(1)} = \frac{2}{3} d_{\Gamma_8}(\Gamma_3) + \frac{4}{3} d_{\Gamma_8}(\Gamma_5), \qquad (\text{П11})$$

$$D_{\Gamma_8}^{(2)} = d_{\Gamma_8}(\Gamma_4) + \frac{2}{3} d_{\Gamma_8}(\Gamma_3) + \frac{1}{3} d_{\Gamma_8}(\Gamma_5), \qquad (\text{П12})$$

$$D_{\Gamma_8}^{(3)} = -\frac{2}{3} d_{\Gamma_8}(\Gamma_3) + \frac{2}{3} d_{\Gamma_8}(\Gamma_5), \qquad (\text{П13})$$

где

$$d_{\Gamma_8}(\Gamma_4) = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_{8'}(\Gamma_{4'})} \frac{(i\langle x_{\Gamma_8}|p_y|z'\rangle)^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}}}, \qquad (\text{П14})$$

$$d_{\Gamma_8}(\Gamma_3) = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_{8'}(\Gamma_3)} \frac{\left(i\left\langle x_{\Gamma_8}|p_x|\sqrt{\frac{3}{2}}(x^2 - y^2)\right\rangle\right)^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8''}}}, \qquad (\text{П15})$$

$$d_{\Gamma_8}(\Gamma_5) = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_{8'}(\Gamma_5)} \frac{\left(i\langle x_{\Gamma_8}|p_y|\epsilon_3\rangle\right)^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}}}. \qquad (\text{П16})$$

Суммы (П14)–(П16) связывают зону Γ_8 с другими зонами, произошедшими из зон $\Gamma_4, \Gamma_3, \Gamma_5$ соответственно. Записывая выражение (33) через эти суммы, мы увидим, что параметр q формируется только суммами, связывающими зону Γ_8 с другими зонами, описывающимися волновыми функциями p-типа,

$$q = -\frac{4}{9} C_{\Gamma_8} + \frac{4}{9} d_{\Gamma_8}(\Gamma_4). \qquad (\text{П17})$$

Расписывая сумму (П14) аналогично тому, как мы делали для суммы C_{Γ_8}, и подставляя ее и (П1) в (П17), мы получаем выражение (34).

Авторы благодарят Е.Л. Ивченко за плодотворные дискуссии.

Список литературы

[1] Bigin Huang, Douwe J. Monsma, Ian Appelbaum. Phys. Rev. Lett. **99**, 177 209 (2007).
[2] Ian Appelbaum, Bigin Huang, Douwe J. Monsma. Nature **447**, 295 (2007).
[3] G. Dresselhaus. Phys. Rev. **100**, *2*, 580 (1955).
[4] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
[5] Р. Уиллардсон, А. Бир. Оптические свойства полупроводников. Мир, М. (1970). С. 188.
[6] J.M. Luttinger. Phy. Rev. **102**, *4*, 1030 (1956).
[7] J.C. Hensel, K. Suzuki. Phys. Rev. Lett. **22**, 838 (1969).
[8] Г.Н. Илуридзе, А.Н. Титков, Е.М. Чайкина. ФТП **21**, *1*, 80 (1987).
[9] В.Д. Дымников. ФТТ **47**, *4*, 591 (2005).
[10] X. Marie, T. Amand, P. Le Jeune, M. Pailard, P. Renucci, L.E. Golub, V.D. Dymnikov, E.L. Ivchenko. Phys. Rev. B **60**, *8*, 5811 (1999).
[11] В.Д. Дымников. ФТТ **43**, *11*, 1957 (2001).
[12] В.Д. Дымников, О.В. Константинов. ФТП **42**, *8*, 934 (2008).
[13] И.М. Цидильковский. Зонная структура полупроводников. Наука, М. (1978). С. 87.
[14] В.Д. Дымников. III Всерос. конф. по физике полупроводников. Тез. докл. М. (1977). С. 211.
[15] Landolt-Bornstein tables / Eds O. Madelung, M. Shulz, H. Weiss. Springer, Berlin (1982). V. 17a. 584 p.
[16] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. Наука, М. (1978). 615 с.
[17] А.Н. Титков, Е.И. Чайкина, Э.М. Комова, Н.Г. Ермакова. ФТП **15**, 345 (1981).
[18] M. Cardona, N.E. Christensen, G. Fasol. Phys. Rev. B **38**, *3*, 1806 (1988).