

Правила сумм для приведенных матричных элементов оператора обобщенного импульса в полупроводниках $A^{III}B^V$

© В.Д. Дымников

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Dymnik@pop.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 5 июля 2004 г.)

Изучена зонная структура полупроводников типа $A^{III}B^V$ вблизи Γ -точки с полным учетом спин-орбитального взаимодействия, проявляющегося не только в расщеплении зон, но и в спин-орбитальном смешивании волновых функций различной пространственной симметрии. Последнее обстоятельство позволило построить новую версию $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ метода теории возмущений и впервые получить строгие симметричные соотношения, связывающие суммы, слагаемые которых содержат оптические матричные элементы и энергетические знаменатели, с внутренними характеристиками электронов (массы, g -факторы). Эти соотношения, или правила сумм, оказываются информативными при анализе пространственной симметрии электронных состояний вблизи Γ -точки и полезными при количественной оценке наиболее важных оптических матричных элементов.

В последнее время наблюдается повышенный интерес к изучению спин-зависимых явлений в полупроводниках. Сформировалось новое направление в электронике — спинтроника, в основе которой спин электрона наряду с его зарядом является активным элементом, используемым в хранении и передаче информации [1]. Со спинтроникой связывают надежды на развитие новых научных областей: квантовые вычисления и квантовая передача информации [2,3]. Однако когда говорят о спине электрона в полупроводниках, подразумевают его магнитный момент, который на самом деле формируется не только спином, но и, как было показано Херрингом [4], в значительной степени межатомным орбитальным движением, которое имеет место внутри волнового пакета, описывающего квазичастицу. Именно представление об электроны как о волновом пакете заложено в методе эффективной массы и именно структурой волнового пакета формируются внутренние характеристики квазичастицы (масса и g -фактор).

Известно [5], что в полупроводниках $A^{III}B^V$ токи в волновом пакете электрона обусловлены спин-орбитальным взаимодействием. Поэтому представляется актуальным более детальное изучение спин-орбитального взаимодействия в полупроводниках и его роли в формировании внутренней структуры электрона.

Обычно при вычислении эффективных масс и g -факторов носителей тока используется зонная модель Кейна [6], в которой спин-орбитальное взаимодействие учитывается только в расщеплении зон при расчете орбитальных состояний в Γ -точке. Однако, как известно [7], спин-орбитальное взаимодействие допускает и смешивание волновых функций различных пространственных симметрий. На последнее обстоятельство обычно не обращают внимания, считая его роль пренебрежимо малой, тем не менее есть ситуации [8–10], когда смешивание играет определяющую роль.

В настоящей работе внутренняя структура частиц рассматривается с полным учетом спин-орбитального взаимодействия в Γ -точке. На основании результатов работы [10], в которой получены общие правила отбора оператора обобщенного импульса $\boldsymbol{\pi}$ в центре зоны Бриллюэна, формулируется новая версия $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$ метода, в которой спин-орбитальное взаимодействие учитывается точно в нулевом приближении и возмущением является только оператор $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$. Такой подход впервые позволил получить строгие симметричные соотношения, связывающие эффективные массы и g -факторы электронов во всех зонах с безразмерными суммами слагаемых, отвечающих оптическим переходам в зоны различных симметрий группы T_d и с точностью до множителя совпадающих с соответствующими силами осцилляторов. Оказалось, что число таких сумм в каждой зоне совпадает с числом характеристик внутренней структуры электрона. Последнее обстоятельство позволило обратить соотношения и выразить суммы через массы и g -факторы. Полученные выражения для сумм названы правилами сумм для приведенных матричных элементов оператора обобщенного импульса, теоретическая новизна этих правил побудила нас вынести их в заглавие статьи. Эти правила сумм оказываются информативными при анализе пространственной симметрии состояний электронов в Γ -точке и позволяют делать количественные оценки оптических матричных элементов.

В настоящей статье по известным массам и g -факторам анализируется пространственная симметрия зон проводимости Γ_6 и валентных зон Γ_7 , Γ_8 и проводится сравнение экспериментальных значений оптического матричного элемента, связывающего зоны Γ_6 и Γ_8 , с их теоретическими значениями, вытекающими из правил сумм, для ряда соединений $A^{III}B^V$. Отмечается хорошее согласование экспериментального значения оптического матричного элемента с известными зонными параметрами и g -факторами во всех рассмотренных

материалах, а также указываются соединения (InSb, GaSb), в которых спин-орбитальное смешивание может проявляться с большой силой. Приводятся экспериментальные данные, могущие свидетельствовать в пользу последнего утверждения.

1. Волновые функции

Без учета спина состояния электронов в Γ -точке в соединениях $A^{III}B^V$ описываются волновыми функциями $|\Gamma_\alpha\rangle$, преобразующимися по представлениям Γ_α ($\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$) [7]. С учетом спина энергетические уровни электронов относятся к спинорным представлениям Γ_n ($n = 6, 7, 8$) и их волновые функции формируются из координатных функций $|\Gamma_\alpha\rangle$ и спиновых функций $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ [7,11].

В общем виде волновые функции электронов в зоне Γ_n можно записать в виде

$$|\Gamma_n; M\rangle = \sum_{\Gamma_\alpha} C_{\Gamma_n \Gamma_\alpha} |\Gamma_n(\Gamma_\alpha); M\rangle, \quad (1)$$

где M — значок вырождения, $|\Gamma_n(\Gamma_\alpha); M\rangle$ — волновые функции, преобразующиеся по представлению Γ_n и сформированные из координатных функций $|\Gamma_\alpha\rangle$. Суммирование в (1) проводится по всем представлениям Γ_α , участвующим в формировании состояния Γ_n . Фазовые множители у функций $|\Gamma_n(\Gamma_\alpha); M\rangle$ предполагаются выбранными так, чтобы коэффициенты смешивания $C_{\Gamma_n \Gamma_\alpha}$ были вещественны. Функции вида (1) считаются нормированными на единицу, т.е. коэффициенты $C_{\Gamma_n \Gamma_\alpha}$ подчиняются условию

$$\sum_{\Gamma_\alpha} C_{\Gamma_n \Gamma_\alpha}^2 = 1. \quad (2)$$

Далее приводятся общие выражения для функций $|\Gamma_n; M\rangle$ во всех зонах $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$

$$|\Gamma_6; M\rangle = \sum_{\Gamma_1} C_{\Gamma_6 \Gamma_1} |\Gamma_6(\Gamma_1); M\rangle + \sum_{\Gamma_5} C_{\Gamma_6 \Gamma_5} |\Gamma_6(\Gamma_5); M\rangle, \quad (3)$$

$$M = \pm \frac{1}{2},$$

$$|\Gamma_7; M\rangle = \sum_{\Gamma_2} C_{\Gamma_7 \Gamma_2} |\Gamma_7(\Gamma_2); M\rangle + \sum_{\Gamma_4} C_{\Gamma_7 \Gamma_4} |\Gamma_7(\Gamma_4); M\rangle, \quad (4)$$

$$M = \pm \frac{1}{2},$$

$$|\Gamma_8; M\rangle = \sum_{\Gamma_3} C_{\Gamma_8 \Gamma_3} |\Gamma_8(\Gamma_3); M\rangle + \sum_{\Gamma_4} C_{\Gamma_8 \Gamma_4} |\Gamma_8(\Gamma_4); M\rangle + \sum_{\Gamma_5} C_{\Gamma_8 \Gamma_5} |\Gamma_8(\Gamma_5); M\rangle, \quad (5)$$

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

Система координат в (3)–(5) предполагается связанной с направлениями [100], [010], [001]. Ось квантования z направлена по [001]. В явном виде спин-орбитальные гармоники $|\Gamma_n(\Gamma_\alpha); M\rangle$ приведены в [10].

2. Правила отбора

В настоящем разделе приводятся правила отбора для оператора $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$, где \mathbf{k} — квазиимпульс, $\boldsymbol{\pi}$ — оператор обобщенного импульса

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V), \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{\hbar}{4mc^2}. \quad (6)$$

Здесь \mathbf{p} — оператор импульса, $\boldsymbol{\sigma}$ — матрицы Паули, V — периодический потенциал, m — масса свободного электрона, c — скорость света, \hbar — постоянная Планка. Матричные элементы оператора $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$ вычисляются между всеми волновыми функциями в Γ -точке. Правила отбора формулируются в терминах коэффициентов Клебша–Гордана и приведенных матричных элементов.

Вычисления, проведенные в [10] с помощью волновых функций (3)–(5), дали следующие матричные элементы для переходов $\Gamma_6 \leftrightarrow \Gamma_8$:

$$\langle \Gamma_6; M | \mathbf{k} \boldsymbol{\pi} | \Gamma_8; M' \rangle = k_{M' - M} C_{1M' - M \frac{1}{2}M}^{\frac{3}{2}M'} \cdot A^{\Gamma_6 \Gamma_8}, \quad (7)$$

$$M = \pm \frac{1}{2}, \quad M' = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2},$$

для переходов $\Gamma_6 \leftrightarrow \Gamma_7$

$$\langle \Gamma_6; M | \mathbf{k} \boldsymbol{\pi} | \Gamma_7; M' \rangle = k_{M' - M} C_{1M' - M \frac{1}{2}M}^{\frac{1}{2}M'} \cdot B^{\Gamma_6 \Gamma_7}, \quad (8)$$

$$M, M' = \pm \frac{1}{2},$$

для переходов $\Gamma_7 \leftrightarrow \Gamma_8$

$$\langle \Gamma_7; M_1 | \mathbf{k} \boldsymbol{\pi} | \Gamma_8; M_2 \rangle = \left[-\sqrt{\frac{10}{3}} k_{+1} C_{\frac{1}{2}M_2 \ 2 \ 1}^{\frac{1}{2}M_1} + \sqrt{\frac{5}{3}} k_0 \left(C_{\frac{1}{2}M_2 \ 2 \ -2}^{\frac{1}{2}M_1} - C_{\frac{1}{2}M_2 \ 2 \ 2}^{\frac{1}{2}M_1} \right) + \sqrt{\frac{10}{3}} k_{-1} C_{\frac{1}{2}M_2 \ 2 \ -1}^{\frac{1}{2}M_1} \right] \cdot C^{\Gamma_7 \Gamma_8}, \quad (9)$$

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

В формулах (7)–(9) k_α ($\alpha = -1, 0, 1$) — циклические компоненты вектора \mathbf{k} [12], $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM}$ — коэффициенты Клебша–Гордана, $A^{\Gamma_6 \Gamma_8}, B^{\Gamma_6 \Gamma_7}, C^{\Gamma_7 \Gamma_8}$ — вещественные приведенные матричные элементы.

Правила отбора для переходов $\Gamma_8 \leftrightarrow \Gamma_8'$ записываются следующим образом [10]

$$\langle \Gamma_8; M | \mathbf{k} \boldsymbol{\pi} | \Gamma_8'; M' \rangle = \frac{1}{3} D_s^{\Gamma_8 \Gamma_8'} (I^s)_{MM'} + \frac{1}{3} D_A^{\Gamma_8 \Gamma_8'} (I^A)_{MM'}, \quad (10)$$

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

Здесь I^s, I^A — эрмитовы и антиэрмитовы матрицы 4×4 , выражающиеся через матрицы J_x, J_y, J_z момента $J = \frac{3}{2}$

$$I^s = k_x \{J_x, J_y^2 - J_z^2\} + k_y \{J_y, J_z^2 - J_x^2\} + k_z \{J_z, J_x^2 - J_y^2\}, \quad (11)$$

$$I^A = i(k_x \{J_y, J_z\} + k_y \{J_z, J_x\} + k_z \{J_x, J_y\}), \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned}
 J_x &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \\
 J_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \\
 J_z &= \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix}. \quad (13)
 \end{aligned}$$

В формулах (11), (12) символ $\{\dots\}$ означает антикоммутатор: $\{A, B\} = AB + BA$. Величины $D_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$, $D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$ в (10) — вещественные приведенные матричные элементы, удовлетворяющие условиям

$$D_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = D_s^{\Gamma_{8'}\Gamma_8}, \quad D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = -D_A^{\Gamma_{8'}\Gamma_8}. \quad (14)$$

Все приведенные матричные элементы, фигурирующие в формулах (7)–(10), выражаются через коэффициенты смешивания и в явном виде представлены в [10].

3. Выражения для эффективных масс в новой версии $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$ метода

Представленные выше правила отбора позволяют сформулировать новую версию $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$ метода, заключающуюся в том, что в нулевом приближении спин-орбитальное взаимодействие учитывается точно и возмущением является только оператор $\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}$. В рамках этой версии можно получить точные симметричные выражения для эффективных масс в Γ -точке во всех зонах. Нас будет интересовать кинетическая энергия электронов в квадратичном по \mathbf{k} приближении. Спектр носителей заряда в вырожденных зонах Γ_n ($n = 6, 7, 8$) будем находить по стандартной схеме теории возмущений [13] путем диагонализации эффективного гамильтониана кинетической энергии $H_{\text{eff.kin.}}$, матричные элементы которого определяются как [11,13]

$$\begin{aligned}
 \langle \Gamma_n; M | H_{\text{eff.kin.}} | \Gamma_n; M' \rangle &= \langle \Gamma_n; M | V_{\mathbf{k}} | \Gamma_n; M' \rangle \\
 &+ \sum_{\Gamma_m M''} \frac{\langle \Gamma_n; M | V_{\mathbf{k}} | \Gamma_m; M'' \rangle \langle \Gamma_m; M'' | V_{\mathbf{k}} | \Gamma_n; M' \rangle}{E_{\Gamma_n} - E_{\Gamma_m}}, \quad (15) \\
 V_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}. \quad (16)
 \end{aligned}$$

В формуле (15) E_{Γ_n} — собственное значение энергии в зоне Γ_n , M'' — значок, обозначающий вырождение состояния в зоне Γ_m . Суммирование в (15) проводится по всем состояниям, отличным от Γ_n .

Рассмотрим вначале спектр электронов в зоне Γ_6 . Использование правил отбора (7), (8) приводит к следующему результату:

$$\langle \Gamma_6; M | H_{\text{eff.kin.}} | \Gamma_6; M' \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\Gamma_6}} \cdot \delta_{MM'}, \quad (17)$$

где $\delta_{MM'}$ — символ Кронекера, m_{Γ_6} — эффективная масса электрона в зоне Γ_6 , определяемая соотношением

$$\frac{m}{m_{\Gamma_6}} = 1 + \frac{4}{3} A_{\Gamma_6} + \frac{2}{3} B_{\Gamma_6}, \quad (18)$$

$$A_{\Gamma_6} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_8} \frac{(A_{\Gamma_6\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8}}, \quad B_{\Gamma_6} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_7} \frac{(B_{\Gamma_6\Gamma_7})^2}{E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_7}}. \quad (19)$$

Отличие эффективной массы от массы свободного электрона обусловлено взаимодействием зоны Γ_6 со всеми зонами Γ_7 и Γ_8 .

Аналогичные вычисления для зоны Γ_7 с использованием правил отбора (8), (9) приводят к результату

$$\langle \Gamma_7; M | H_{\text{eff.kin.}} | \Gamma_7; M' \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\Gamma_7}} \delta_{MM'}, \quad (20)$$

где m_{Γ_7} — эффективная масса электрона в зоне Γ_7 , определяемая соотношением

$$\frac{m}{m_{\Gamma_7}} = 1 + \frac{2}{3} B_{\Gamma_7} + \frac{4}{3} C_{\Gamma_7}, \quad (21)$$

$$B_{\Gamma_7} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_6} \frac{(B_{\Gamma_6\Gamma_7})^2}{E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_6}}, \quad C_{\Gamma_7} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_8} \frac{(C_{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_8}}. \quad (22)$$

Суммы (22) характеризуют взаимодействие зоны Γ_7 со всеми зонами Γ_6 , Γ_8 , и они ответственны за формирование эффективной массы m_{Γ_7} .

В отличие от зон Γ_6 , Γ_7 энергетический спектр в зоне Γ_8 — анизотропный, и $H_{\text{eff.kin.}}$ наряду с квадратичными по \mathbf{k} членами содержит и линейные по \mathbf{k} члены

$$\langle \Gamma_8; M | H_{\text{eff.kin.}} | \Gamma_8; M' \rangle = (H_{\text{eff.kin.}}^{(1)})_{MM'} + (H_{\text{eff.kin.}}^{(2)})_{MM'}. \quad (23)$$

Найдем вначале матрицу $H_{\text{eff.kin.}}^{(2)}$, описывающую квадратичную по \mathbf{k} часть спектра в зоне Γ_8 . Используя (15) и правила отбора (7), (9), (10), приходим к заключению, что эта часть спектра формируется за счет взаимодействия зоны Γ_8 со всеми зонами Γ_6 , Γ_7 и другими зонами Γ_8 , которые характеризуются суммами

$$A_{\Gamma_8} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_6} \frac{(A_{\Gamma_6\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6}}, \quad C_{\Gamma_8} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_7} \frac{(C_{\Gamma_7\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7}}, \quad (24)$$

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

$$D_{\Gamma_8}^{(3)} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_{8'}}' \frac{D_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} \cdot D_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}}}. \quad (25)$$

Если ввести обозначения

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= -1 - \frac{2}{3}A_{\Gamma_8} - \frac{2}{3}C_{\Gamma_8} - \frac{2}{3}D_{\Gamma_8}^{(1)} - \frac{2}{3}D_{\Gamma_8}^{(2)}, \\ \gamma_2 &= -\frac{1}{3}A_{\Gamma_8} + \frac{1}{3}C_{\Gamma_8} + \frac{2}{3}D_{\Gamma_8}^{(3)}, \\ \gamma_3 &= -\frac{1}{3}A_{\Gamma_8} - \frac{1}{3}C_{\Gamma_8} + \frac{1}{3}D_{\Gamma_8}^{(1)},\end{aligned}\quad (26)$$

то $H_{\text{eff.kin.}}^{(2)}$ в матричной форме можно записать в виде

$$\begin{aligned}H_{\text{eff.kin.}}^{(2)} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left[-\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right)I \right. \\ &\quad + 2\gamma_2 (v_x^2 J_x^2 + v_y^2 J_y^2 + v_z^2 J_z^2) + 2\gamma_3 (v_x v_y \{J_x, J_y\} \\ &\quad \left. + v_y v_z \{J_y, J_z\} + v_z v_x \{J_z, J_x\}) \right], \\ \mathbf{v} &= \frac{\mathbf{k}}{k}.\end{aligned}\quad (27)$$

Здесь I — единичная матрица 4×4 , матрицы J_x, J_y, J_z даются выражениями (13). Выражение (27) в точности совпадает с гамильтонианом Латинжера [14], поэтому величины $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — суть параметры Латинжера. Мы не пишем значок Γ_8 у параметров $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ в (26), чтобы не загромождать формулы. Понятно, что у каждой зоны Γ_8 свой набор параметров Латинжера. Соотношения (26) указывают на природу формирования спектра в зоне Γ_8 .

Часто на практике используют сферическую модель валентной зоны, полагая $\gamma_2 = \gamma_3$. Из (26) видно, что это допущение соответствует пренебрежению взаимодействием зоны Γ_8 с зонами Γ_7 и Γ_8' . Как будет показано далее, такое допущение для многих материалов $A^{III}B^V$ является разумным, поскольку параметры Латинжера формируются главным образом за счет взаимодействия с зонами Γ_6 .

Что же касается линейного по \mathbf{k} члена $H_{\text{eff.kin.}}^{(1)}$ в (23), то он происходит из линейного по $V_{\mathbf{k}}$ слагаемого в (15) и обусловлен отсутствием центра инверсии. По симметричным соображениям [11,15] его можно записать в виде

$$\begin{aligned}H_{\text{eff.kin.}}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} c_k (k_x \{J_x, J_y^2 - J_z^2\} \\ &\quad + k_y \{J_y, J_z^2 - J_x^2\} + k_z \{J_x, J_y^2 - J_z^2\}).\end{aligned}\quad (28)$$

Из правил отбора (10) следует, что параметр c_k [15] выражается через коэффициент $D_s^{\Gamma_8 \Gamma_8}$ [10] следующим образом:

$$c_k = \frac{\hbar}{m} \sqrt{3} D_s^{\Gamma_8 \Gamma_8}.\quad (29)$$

Выражения (18), (21), (26), (29) исчерпывают собой характеристики энергетического спектра электронов вблизи Γ -точки в квадратичном по \mathbf{k} приближении в $A^{III}B^V$.

4. g -факторы электронов

Новая версия $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$ метода позволяет получить точные симметричные выражения для g -факторов электронов во всех зонах. Согласно методу эффективной массы [11], зеемановский член H'_{Γ_n} в эффективном гамильтониане, описывающем взаимодействие электрона в зоне Γ_n с магнитным полем, в матричной форме записывается следующим образом [11]:

$$\begin{aligned}(H'_{\Gamma_n})_{MM'} &= \frac{1}{2} \mu_0 \sum_{\gamma} H_{\gamma} \left[g_0 \langle \Gamma_n; M | \sigma_{\gamma} | \Gamma_n; M' \rangle \right. \\ &\quad \left. - \frac{i2}{m} \sum'_{\Gamma_m, M''} \frac{\langle \Gamma_n; M | \pi_{\alpha} | \Gamma_m; M'' \rangle \langle \Gamma_m; M'' | \pi_{\beta} | \Gamma_n; M' \rangle}{E_{\Gamma_n} - E_{\Gamma_m}} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \right].\end{aligned}\quad (30)$$

Здесь значки α, β, γ обозначают декартовы проекции векторов, H_{γ} — магнитное поле, $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор 3-го ранга. Значок M'' относится к вырожденным состояниям зоны Γ_m , μ_0 — магнетон Бора, g_0 — g -фактор свободного электрона, σ_{γ} — матрицы Паули.

В зоне Γ_6 электрон описывается двухкомпонентным спинором и, используя метод инвариантов [11], гамильтониан (30) можно записать в виде

$$(H'_{\Gamma_6})_{MM'} = \frac{1}{2} g_{\Gamma_6} \mu_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H})_{MM'}.\quad (31)$$

Здесь g_{Γ_6} — эффективный g -фактор электрона в зоне Γ_6 .

Проводя вычисления по формулам (30), (31) с использованием правил отбора (7), (8) и учитывая, что $g_0 = 2$, можно получить следующее выражение для эффективного g -фактора электрона в зоне Γ_6 :

$$g_{\Gamma_6} = 2 \left(1 - \frac{4}{3} \alpha^2 \right) - \frac{4}{3} A_{\Gamma_6} + \frac{4}{3} B_{\Gamma_6},\quad (32)$$

$$\alpha^2 = \sum_{\Gamma_5} (C_{\Gamma_6 \Gamma_5})^2.\quad (33)$$

Суммы $A_{\Gamma_6}, B_{\Gamma_6}$ в (32) выражаются формулами (19). Первое слагаемое в (32) происходит от среднего спина электрона в состоянии Γ_6 , а остальные слагаемые обусловлены внутренним орбитальным моментом электрона. При вычислении (32) было использовано условие нормировки (2).

Аналогичные вычисления для зоны Γ_7 с использованием правил отбора (8), (9) приводят к следующему выражению для эффективного g -фактора электрона в зоне Γ_7 :

$$g_{\Gamma_7} = 2 \left(-\frac{1}{3} + \frac{4}{3} \beta^2 \right) + \frac{4}{3} B_{\Gamma_7} - \frac{4}{3} C_{\Gamma_7},\quad (34)$$

$$\beta^2 = \sum_{\Gamma_2} (C_{\Gamma_7 \Gamma_2})^2.\quad (35)$$

Здесь суммы $B_{\Gamma_7}, C_{\Gamma_7}$ даются выражениями (22). Появление суммы (35) в (34) связано с условием нормировки (2).

В зоне Γ_8 волновые функции электронов четырехкомпонентны и зеемановский член H'_{Γ_8} (30) будет задаваться матрицей 4×4 . Согласно Латинжеру [14], эта матрица записывается через матрицы момента $J = \frac{3}{2}$ (13) в виде

$$(H'_{\Gamma_8})_{MM'} = -2\mu_0 [\kappa \mathbf{J} \cdot \mathbf{H} + q(J_x^3 H_x + J_y^3 H_y + J_z^3 H_z)]_{MM'}. \quad (36)$$

В формуле (36) безразмерные параметры Латинжера κ , q характеризуют собственный магнитный момент электрона в зоне Γ_8 .

Проводя вычисления по формулам (30), (36) с использованием правил отбора (7), (9), (10), можно получить следующие выражения для параметров κ и q :

$$\kappa = -\frac{1}{3} - \frac{5}{6} s^2 + \frac{13}{9} t^2 - \frac{1}{3} A_{\Gamma_8} + \frac{10}{9} C_{\Gamma_8} + \frac{7}{18} D_{\Gamma_8}^{(1)} - \frac{7}{9} D_{\Gamma_8}^{(2)} - \frac{13}{18} D_{\Gamma_8}^{(3)}, \quad (37)$$

$$q = \frac{2}{3} s^2 - \frac{4}{9} t^2 - \frac{4}{9} C_{\Gamma_8} - \frac{2}{9} D_{\Gamma_8}^{(1)} + \frac{4}{9} D_{\Gamma_8}^{(2)} + \frac{2}{9} D_{\Gamma_8}^{(3)}, \quad (38)$$

$$s^2 = \sum_{\Gamma_3} (C_{\Gamma_8 \Gamma_3})^2, \quad t^2 = \sum_{\Gamma_5} (C_{\Gamma_8 \Gamma_5})^2. \quad (39)$$

При выводе (37), (38) было использовано соотношение

$$\sum_{\Gamma_4} (C_{\Gamma_8 \Gamma_4})^2 = 1 - s^2 - t^2, \quad (40)$$

вытекающее из условия нормировки волновых функций (2).

Выражения (32), (34), (37), (38) исчерпывают собой всю информацию о g -факторах электронов вблизи Γ -точки в кристаллах $A^{III}B^V$. Они являются точными симметричными соотношениями, в полной мере учитывающими спин-орбитальное взаимодействие.

5. Правила сумм для приведенных матричных элементов

Полученные выше соотношения (18), (21), (26), (32), (34), (37), (38) выражают наблюдаемые физические величины через суммы, слагаемые которых содержат оптические матричные элементы. Видно, что число сумм в каждой зоне совпадает с числом внутренних характеристик электрона (массы, g -факторы). Для анализа матричных элементов удобно обратиться к указанным выше соотношениям и выразить суммы через наблюдаемые величины. Обратные соотношения записываются следующим образом:

$$A_{\Gamma_6} = \frac{1}{2} \frac{m}{m_{\Gamma_6}} - \frac{1}{4} g_{\Gamma_6} - \frac{2}{3} \alpha^2, \quad (41)$$

$$B_{\Gamma_6} = \frac{1}{2} \left(\frac{m}{m_{\Gamma_6}} + g_{\Gamma_6} \right) - \frac{3}{2} + \frac{4}{3} \alpha^2, \quad (42)$$

$$B_{\Gamma_7} = \frac{1}{2} \left(\frac{m}{m_{\Gamma_7}} + g_{\Gamma_7} \right) - \frac{1}{6} - \frac{4}{3} \beta^2, \quad (43)$$

$$C_{\Gamma_7} = \frac{1}{2} \frac{m}{m_{\Gamma_7}} - \frac{1}{4} g_{\Gamma_7} - \frac{2}{3} + \frac{2}{3} \beta^2, \quad (44)$$

$$A_{\Gamma_8} = -\frac{1}{4} (\gamma_1 + 2\gamma_2 + 3\gamma_3) - \frac{5}{4} \kappa - \frac{41}{16} q - \frac{2}{3} (1 - s^2 - t^2), \quad (45)$$

$$C_{\Gamma_8} = -\frac{1}{4} (\gamma_1 - 2\gamma_2 + 3\gamma_3) + \frac{3}{4} \kappa + \frac{15}{16} q - \frac{2}{3} t^2, \quad (46)$$

$$D_{\Gamma_8}^{(1)} = -\frac{1}{2} \gamma_1 + \frac{3}{2} \gamma_3 - \frac{1}{2} \kappa - \frac{13}{18} q - \frac{2}{3} (1 - s^2), \quad (47)$$

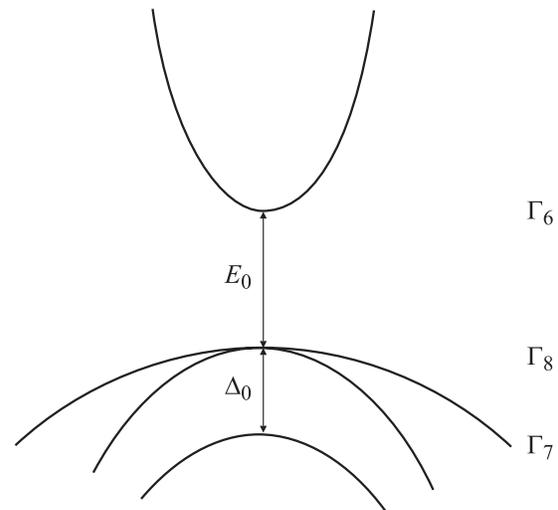
$$D_{\Gamma_8}^{(2)} = -\frac{1}{2} \gamma_1 + \kappa + \frac{13}{4} q - \frac{1}{6} - \frac{4}{3} s^2, \quad (48)$$

$$D_{\Gamma_8}^{(3)} = \gamma_2 - \kappa - \frac{7}{4} q - \frac{1}{3} + \frac{1}{3} s^2 + \frac{2}{3} t^2. \quad (49)$$

6. Выводы

Полученные правила сумм для матричных элементов (41)–(49) позволяют получить полезную информацию о полупроводниках типа $A^{III}B^V$. По ним, в частности, можно судить о пространственной симметрии электронных состояний вблизи Γ -точки и количественно оценивать некоторые оптические матричные элементы.

В настоящем разделе сделаны выводы о пространственной симметрии зоны проводимости и валентной зоны и получена оценка оптического матричного элемента, связывающего зону проводимости и валентную зону. Далее будем пользоваться зонной схемой, представленной на рисунке.



Трехзонная модель полупроводников $A^{III}B^V$ вблизи Γ -точки. Γ_6 — зона проводимости, Γ_8 , Γ_7 — валентные зоны. $E_0 = E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8}$ — ширина запрещенной зоны, $\Delta_0 = E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7}$ — величина спин-орбитального расщепления.

Таблица 1. Зонные параметры и g -факторы в полупроводниках $A^{III}B^V$

| Параметр | Соединение | | | | |
|--------------------------|------------|--------|--------|--------|-------|
| | InSb | InAs | InP | GaSb | GaAs |
| E_0 (eV) | 0.235 | 0.42 | 1.424 | 0.813 | 1.519 |
| Δ_0 (eV) | 0.803 | 0.38 | 0.108 | 0.76 | 0.340 |
| $\frac{m_{\Gamma_6}}{m}$ | 0.014 | 0.025 | 0.08 | 0.0412 | 0.067 |
| $\frac{m_{\Gamma_7}}{m}$ | -0.1 | -0.089 | -0.121 | -0.15 | -0.15 |
| g_{Γ_6} | -51.3 | -14.8 | 1.48 | -9.1 | -0.44 |
| g_{Γ_7} | -10 | -13.0 | -1.95 | -6.2 | -4.9 |
| κ | 17 | 7.86 | 1.47 | 3.5 | 1.72 |
| q | 0.39 | 0.04 | 0.02 | 0.13 | 0.04 |
| γ_1 | 40.1 | 19.67 | 5.05 | 13.2 | 6.85 |
| γ_2 | 18.1 | 8.37 | 1.6 | 4.4 | 2.10 |
| γ_3 | 19.2 | 9.29 | 1.73 | 5.7 | 2.90 |

Таблица 2. Суммы приведенных матричных элементов и основные матричные элементы в полупроводниках $A^{III}B^V$

| Суммы и матричные элементы | Соединение | | | | |
|--|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| | InSb | InAs | InP | GaSb | GaAs |
| $A_{\Gamma_6} + \frac{2}{3}\alpha^2$ | 48.54 | 23.7 | 5.88 | 14.41 | 7.57 |
| $B_{\Gamma_6} - \frac{4}{3}\alpha^2$ | 8.56 | 11.1 | 5.49 | 6.09 | 5.74 |
| $B_{\Gamma_7} + \frac{4}{3}\beta^2$ | -10.17 | -12.28 | -5.27 | -6.60 | -5.95 |
| $A_{\Gamma_8} - \frac{2}{3}(s^2 + t^2)$ | -56.39 | -26.44 | -5.92 | -15.15 | -7.86 |
| $\frac{\hbar}{m} A^{\Gamma_6\Gamma_8} $ (а.у.) | 0.675 (0.694) | 0.623 (0.618) | 0.557 (0.560) | 0.666 (0.691) | 0.658 (0.660) |
| $\frac{\hbar}{m} B^{\Gamma_6\Gamma_7} $ (а.у.) | 0.600 | 0.588 | 0.552 | 0.559 | 0.663 |

В табл. 1 представлены значения зонных параметров, эффективных масс и g -факторов для ряда соединений $A^{III}B^V$ в зоне проводимости Γ_6 и валентных зонах Γ_8 , Γ_7 . Значения для табл. 1 взяты из [15–17].

В табл. 2 для тех же соединений приведены значения сумм A_{Γ_6} , A_{Γ_8} , B_{Γ_6} , B_{Γ_7} , вычисленных по формулам (41), (45), (42), (43) соответственно, с использованием данных табл. 1. По значениям сумм A_{Γ_6} , A_{Γ_8} , B_{Γ_6} , B_{Γ_7} , приведенных в табл. 2, можно произвести оценку матричных элементов $|A^{\Gamma_6\Gamma_8}|$, $|B^{\Gamma_6\Gamma_7}|$, ответственных за оптические переходы $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$, $\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$, не делая каких-либо предположений о пространственной симметрии волновых функций в Γ -точке. Это связано с тем, что параметры α^2 (33), β^2 (35), s^2 , t^2 (39), характеризующие смешивание волновых функций, не превосходят единицы, и потому можно с хорошей точностью полагать, что числа, фигурирующие в табл. 2, относятся непосредственно к суммам A_{Γ_6} , A_{Γ_8} , B_{Γ_6} , B_{Γ_7} , абсолютные значения которых много больше единицы. С другой стороны, из состава этих сумм (19), (22), (24) и близости значений A_{Γ_6} и $|A_{\Gamma_8}|$, B_{Γ_6} и $|B_{\Gamma_7}|$ можно заключить, что эти суммы формируются главным образом за счет

взаимодействия ближайших соседних зон Γ_6 и Γ_8 , Γ_6 и Γ_7 . На этом основании представляется разумным при оценке матричных элементов $|A^{\Gamma_6\Gamma_8}|$ и $|B^{\Gamma_6\Gamma_7}|$ пользоваться соотношениями

$$\frac{1}{m} \frac{(A^{\Gamma_6\Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8}} \cong \frac{1}{2}(A_{\Gamma_6} - A_{\Gamma_8}), \quad (50)$$

$$\frac{1}{m} \frac{(B^{\Gamma_6\Gamma_7})^2}{E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_7}} \cong \frac{1}{2}(B_{\Gamma_6} - B_{\Gamma_7}). \quad (51)$$

В табл. 2 приведены значения матричных элементов $\frac{\hbar}{m}|A^{\Gamma_6\Gamma_8}|$, $\frac{\hbar}{m}|B^{\Gamma_6\Gamma_7}|$ в атомных единицах, вычисленных по формулам (50), (51) с использованием данных табл. 1 и 2. В скобках приведены значения матричных элементов $\frac{\hbar}{m}|A^{\Gamma_6\Gamma_8}|$, полученных из магнитооптических экспериментов. Эти значения брались из обзора Эрманна и Вайсбуша, опубликованного в [18], там же приведены ссылки на оригинальные работы. Близкие значения вычисленных и экспериментальных величин говорят о хорошем согласовании матричного элемента $A^{\Gamma_6\Gamma_8}$ с зонными параметрами и g -факторами.

По данным табл. 2 можно сделать выводы о пространственной симметрии зоны проводимости и валентной зоны. Видно, что в трех материалах из пяти матричные элементы $|A^{\Gamma_6\Gamma_8}|$ и $|B^{\Gamma_6\Gamma_7}|$ близки друг к другу. Тогда, в связи с тем, что в пренебрежении спин-орбитальным смешиванием [10] выполняется равенство $A^{\Gamma_6\Gamma_8} = B^{\Gamma_6\Gamma_7} = -i\langle s|p_x|x\rangle$, можно полагать, что в этих соединениях волновые функции в зонах Γ_6 и Γ_8 являются преимущественно функциями s - и p -типов соответственно, как это принято в модели Кейна [6]. Малое отличие матричных элементов позволяет надеяться, что эффекты смешивания в зонах Γ_6 , Γ_7 , Γ_8 малы, т.е. $\alpha^2, \beta^2, s^2, t^2 \ll 1$.

В соединениях InSb и GaSb имеется некоторое различие в матричных элементах. Можно полагать, что в этих материалах эффекты смешивания проявляются сильнее. В пользу последнего говорит эксперимент [16], в котором наблюдалось сильное поглощение в p -GaSb на „запрещенных“ переходах $\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_8$ ($\alpha \cong 2 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$, α — коэффициент поглощения). Как известно, переходы $\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_8$ при $k=0$ возможны только при наличии смешивания (см., например, [8]).

Автор благодарит Е.Л. Ивченко за стимулирующие дискуссии, В.И. Переля и его сотрудников за обсуждение на семинаре, О.В. Константинова за полезные обсуждения и сделанные замечания.

Список литературы

- [1] G.A. Prinz. Science **282**, 1660 (1998).
- [2] D.P.Di Vincenzo. Science **270**, 255 (1995).
- [3] К.А. Валиев, А.А. Кокин. Квантовые компьютеры: надежда и реальность. НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, Ижевск (2001). 352 с.
- [4] Y. Yafet. In: Solid State Physics. Vol. 14 / Ed. F. Seitz, D. Turnbull. Academic, N.Y. (1963). p. 93.

- [5] L.M. Roth, V. Lax, S. Zwerdling. Phys. Rev. **114**, 90 (1959).
- [6] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
- [7] G. Dresselhaus. Phys. Rev. **100**, 2, 580 (1955).
- [8] В.Д. Дымников. III Всерос. конф. по физике полупроводников. Тез. докл. М. (1997). С. 211.
- [9] X. Marie, T. Amand, P. Le Jeune, M. Paillard, P. Renucci, L.E. Golub, V.D. Dymnikov, E.L. Ivchenko. Phys. Rev. B **60**, 8, 5811 (1999).
- [10] В.Д. Дымников. ФТТ **43**, 11, 1957 (2001).
- [11] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).
- [12] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалёв, В.Р. Херсонский. Квантовая теория углового момента. Наука, Л. (1975).
- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989).
- [14] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 4, 1030 (1956).
- [15] M. Cardona, N.E. Christensen, G. Fasol. Phys. Rev. B **38**, 3, 1806 (1988).
- [16] Г.Н. Илуридзе, А.Н. Титков, Е.М. Чайкина. ФТП **21**, 1, 80 (1987).
- [17] Landolt-Börnstein Tables / Ed. O. Madelung, M. Schulz, H. Weiss. Springer, Berlin (1982). Vol. 17a.
- [18] Оптическая ориентация / Под ред. Б.П. Захарчени, Ф. Майера. Наука, Л. (1989).