Правила отбора для матричных элементов оператора обобщенного импульса π в Γ-точке в полупроводниках A_3B_5

© В.Д. Дымников

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

(Поступила в Редакцию 5 марта 2001 г.)

Впервые выведены точные правила отбора для матричных элементов оператора обобщенного импульса $\boldsymbol{\pi}$ в полупроводниках без центра инверсии типа GaAs в Γ-точке с полным учетом спин-орбитального взаимодействия, проявляющегося как в расщеплении орбитальных состояний, так и в их смешивании. Получены, в частности, правила отбора для "запрещенных" оптических переходов $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ в валентной зоне. Правила отбора сформулированы в терминах коэффициентов Клебша–Гордана и приведенных матричных элементов. Установлена связь приведенных матричных элементов с параметрами смешивания волновых функций.

В полупроводниках A_3B_5 исключительно важную роль играют матричные элементы оператора импульса в Γ-точке. Эти матричные элементы характеризуют в прямозонных материалах оптические переходы и определяют спектр масс и g-факторы носителей заряда. Различные многозонные версии $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ метода теории возмущений, построенные на этих элементах, постоянно совершенствуются и широко используются при исследовании электронных и оптических свойств объемных и низкоразмерных полупроводниковых структур (см., например, [1–3]). Обычно при расчетах используются матричные элементы, следующие из модели Кейна [4], которая учитывает тетраэдрическую симметрию и спин-орбитальное расщепление зон. По модели Кейна носители заряда в Γ-точке имеют простую внутреннюю структуру: электроны в зоне проводимости Γ_6 описываются волновыми функциями s-типа, а в валентных зонах Γ_7, Γ_8 — волновыми функциями p-типа. Однако модель Кейна, удовлетворительная во многих случаях, не является общей моделью, так как не учитывает в полной мере спин-орбитальное взаимодействие. Согласно [4], спин-орбитальное взаимодействие сводится к расщеплению орбитальных состояний в центре зоны Бриллюэна, в то время как теория симметрии [5] допускает наряду с расщеплением и спин-орбитальное смешивание различных по симметрии пространственных функций в Γ-точке. На последнее обстоятельство обычно не обращают внимания, по-видимому считая его роль пренебрежимо малой. Однако имеются ситуации, когда именно смешивание волновых функций играет определяющую роль. К их числу относятся, например, линейное по $\mathbf{k}$ ($\mathbf{k}$ — квазиимпульс) расщепление валентной зоны Γ_8 и оптические переходы $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ внутри валентной зоны. Последние переходы принято считать "запрещенными" [6], но теория симметрии такие переходы разрешает. На возможную важную роль "запрещенных" переходов $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ указывает эксперимент [7] по поглощению излучения на свободных дырках в p-GaSb. Предварительные исследования, выполненные в трехзонной модели [8], свидетельствуют в пользу этого.

Смешивание волновых функций в Γ-точке означает, что носители тока имеют сложную внутреннюю структуру, обусловленную корреляцией спина с орбитальным движением, — более сложную, чем это заложено в модели Кейна. Сложность внутренней структуры может оказаться существенной при изучении поляризационных свойств носителей заряда как в объемных, так и в низкоразмерных материалах. Недавние исследования поперечного g-фактора ($g_\perp$) тяжелых дырок в квантовой яме GaAs/AlGaAs (001) [9] показали, что измеряемая величина $g_\perp$ непосредственно связана с параметром Латинжера q [10], характеризующим объемные свойства GaAs и имеющим релятивистскую природу[11]. При вычислении параметра q в [9] удовлетворительного согласия с экспериментом удалось достичь только путем выхода за рамки модели Кейна и учета спин-орбитального смешивания. Всестороннее изучение поляризационных свойств носителей тока представляется актуальным также в связи с практическим использованием полупроводников A_3B_5 и структур на их основе в качестве источников поляризованных электронов [12].

Приведенные выше примеры свидетельствуют о том, что в ряде задач модель Кейна является ограниченной, и требуется ее обобщение на случай полного учета спин-орбитального взаимодействия. В настоящей работе приведены общие выражения для спин-орбитальных гармоник во всех зонах в Γ-точке с учетом спин-орбитального смешивания и выведены правила отбора для оператора обобщенного импульса $\boldsymbol{\pi}$ между всеми состояниями в центре зоны Бриллюэна. Результаты представлены в терминах коэффициентов Клебша–Гордана и приведеннных матричных элементов. Приведенные матричные элементы записаны через параметры смешивания волновых функций, что делает их удобными в практических расчетах при использовании конкретных моделей смешивания.

Полученные результаты позволяют изучать, в частности, запрещенные оптические переходы $\Gamma_7 \to \Gamma_8$ и получать оптическими методами информацию о пространственной симметрии возбужденных состояний в Γ-точке. Расположение и симметрия возбужденных состояний крайне важны также при рассмотрении линейного по $\mathbf{k}$ расщепления валентной зоны Γ_8, которое до сих пор еще плохо изучено. Кроме того, полученные правила отбора позволяют развить новую версию $\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\pi}$ метода, в котором спин-орбитальное взаимодействие учтено точно, и в рамках этого подхода получить самые общие выражения для эффективных масс и g-факторов носителей тока, допускаемые тетраэдрической симметрией, в A_3B_5 в Γ-точке для всех зон.

1. Волновые функции

Состояния электронов в кристаллах тетраэдрической симметрии в Γ-точке описываются волновыми функциями $\Psi_n(\mathbf{r})$, удовлетворяющими уравнению Шредингера,

$$H\Psi_n = (H_0 + H_{\text{rel}})\Psi_n = E_n\Psi_n, \tag{1}$$

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \tag{2}$$

$$H_{\text{rel}} = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\nabla}V \times \mathbf{p}). \tag{3}$$

Здесь m — масса электрона, $V(\mathbf{r})$ — периодический потенциал, $\boldsymbol{\sigma}$ — матрицы Паули, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, значок n нумерует зоны, E_n — энергия электрона в зоне n. Гамильтониан H в (1) записан в релятивистском приближении с точностью до первого порядка по параметру c^{-2} [13]. Релятивистское слагаемое H_{rel} (3) содержит три члена. Первые два члена приводят к сдвигу уровней гамильтониана H_0 (2) и перемешиванию волновых функций, относящихся к одному типу координатного представления. Третье слагаемое, зависящее от спина, ответственно за орбитальное расщепление и смешивание в Γ-точке волновых функций, относящихся к разным типам представлений, по которым преобразуются собственные волновые функции оператора H_0. В дальнейшем для волновых функций в точке Γ будут использоваться дираковские обозначения

$$\Psi_n(\mathbf{r}) \equiv |\Gamma_n\rangle. \tag{4}$$

Без учета спина энергетические уровни гамильтониана H_0 в кристаллах A_3B_5 относятся к пяти типам состояний, волновые функции которых преобразуются по неприводимым представлениям $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$ [5]. Уровни состояний Γ_1, Γ_2 не вырождены, состояния Γ_3 двукратно вырождены, состояния Γ_4, Γ_5 трехкратно вырождены. Базисные функции $|\Gamma_\alpha\rangle (\alpha = 1, 2, 3, 4, 5)$ для неприводимых представлений в Γ-точке записываются в виде [5]

$$|\Gamma_1\rangle = s, \tag{5}$$

$$|\Gamma_2\rangle = s_1 = \mathrm{x}^4(y^2 - z^2) + \mathrm{y}^4(z^2 - x^2) + z^4(\mathrm{x}^2 - \mathrm{y}^2), \tag{6}$$

$$|\Gamma_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(2z^2 - x^2 - y^2), \quad \sqrt{\frac{3}{2}}(x^2 - y^2), \tag{7}$$

$$|\Gamma_4\rangle = x, y, z, \tag{8}$$

$$|\Gamma_5\rangle = \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \tag{9}$$

где

$$\epsilon_1 = \mathrm{x}(\mathrm{y}^2 - z^2), \quad \epsilon_2 = y(z^2 - x^2), \quad \epsilon_3 = z(x^2 - y^2). \tag{10}$$

В формулах (5)–(10) s — тетраэдрический инвариант, x, y, z — координатные функции, преобразующиеся при тетраэдрических преобразованиях как проекции вектора x, y, z. Все базисные функции (5)–(10) предполагаются вещественными и нормированными на единицу. Система координат здесь и в дальнейшем предполагается связанной с направлениями [100], [010], [001]. За ось квантования принята ось z, направленная по [001].

Собственные функции оператора H (1) относятся к спинорным представлениям Γ_n $(n = 6, 7, 8)$ [5,14]. Они формируются из орбитальных функций вида (5)–(9) и спиновых функций: $\alpha = \binom{1}{0}$ $\beta = \binom{0}{1}$ в соответствии с правилами умножения представлений $\Gamma_\alpha \times \mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ $(\alpha = 1, 2, 3, 4, 5)$, где $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ — представление, по которому преобразуются спиновые функции. Таблица умножения представлений приведена в [5]. Ниже приводятся окончательные результаты для всех спинорных состояний в Γ-точке в кристалле A_3B_5. Состояния Γ_6 двукратно вырождены и их базисные функции $|\Gamma_6; M\rangle$ $\left(M = \pm\frac{1}{2}\right)$ можно записать следующим образом:

$$|\Gamma_6; M\rangle = \sum_{\Gamma_1} C_{\Gamma_6\Gamma_1}|\Gamma_6(\Gamma_1); M\rangle + \sum_{\Gamma_5} C_{\Gamma_6\Gamma_5}|\Gamma_6(\Gamma_5); M\rangle, \tag{11}$$

где

$$\left|\Gamma_6(\Gamma_1); \frac{1}{2}\right\rangle = is\alpha, \quad \left|\Gamma_6(\Gamma_1); -\frac{1}{2}\right\rangle = is\beta, \tag{12}$$

$$\begin{cases} \left|\Gamma_6(\Gamma_5); \frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left[(\epsilon_1 + i\epsilon_2)\beta + \epsilon_3\alpha\right], \\ \left|\Gamma_6(\Gamma_5); -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\epsilon_3\beta - (\epsilon_1 - i\epsilon_2)\alpha\right]. \end{cases} \tag{13}$$

В зоне Γ_7 состояния также двукратно вырождены и их базисные функции $|\Gamma_7; M\rangle$ $\left(M = \pm\frac{1}{2}\right)$ записываются в виде

$$|\Gamma_7; M\rangle = \sum_{\Gamma_2} C_{\Gamma_7\Gamma_2}|\Gamma_7(\Gamma_2); M\rangle + \sum_{\Gamma_4} C_{\Gamma_7\Gamma_4}|\Gamma_7(\Gamma_4); M\rangle, \tag{14}$$

где

$$\left|\Gamma_7(\Gamma_2); \frac{1}{2}\right\rangle = is_1\alpha, \quad \left|\Gamma_7(\Gamma_2); -\frac{1}{2}\right\rangle = is_1\beta, \tag{15}$$

$$\begin{cases} \left|\Gamma_7(\Gamma_4); \frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left[(x + iy)\beta + z\alpha\right], \\ \left|\Gamma_7(\Gamma_4); -\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left[z\beta - (x - iy)\alpha\right]. \end{cases} \tag{16}$$

Состояния Γ_8 в A_3B_5 четырехкратно вырождены. Их волновые функции $|\Gamma_8;M\rangle$ ($M = \pm\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}$) могут быть представлены как

$$|\Gamma_8;M\rangle = \sum_{\Gamma_3} C_{\Gamma_8\Gamma_3}|\Gamma_8(\Gamma_3);M\rangle + \sum_{\Gamma_4} C_{\Gamma_8\Gamma_4}|\Gamma_8(\Gamma_4);M\rangle + \sum_{\Gamma_5} C_{\Gamma_8\Gamma_5}|\Gamma_8(\Gamma_5);M\rangle, \quad (17)$$

где

$$\begin{cases} \left|\Gamma_8(\Gamma_3);\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(2z^2-x^2-y^2)\beta, \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_3);\frac{1}{2}\right\rangle = i\sqrt{\frac{3}{2}}(x^2-y^2)\alpha, \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_3);-\frac{1}{2}\right\rangle = -i\sqrt{\frac{3}{2}}(x^2-y^2)\beta, \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_3);-\frac{3}{2}\right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}(2z^2-x^2-y^2)\alpha, \end{cases} \quad (18)$$

$$\begin{cases} \left|\Gamma_8(\Gamma_4);\frac{3}{2}\right\rangle = -(x+iy)\frac{\alpha}{\sqrt{2}}, \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_4);\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[-(x+iy)\frac{\beta}{\sqrt{2}}+\sqrt{2}z\alpha\right], \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_4);-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[(x-iy)\frac{\alpha}{\sqrt{2}}+\sqrt{2}z\beta\right], \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_4);-\frac{3}{2}\right\rangle = (x-iy)\frac{\beta}{\sqrt{2}}, \end{cases} \quad (19)$$

$$\begin{cases} \left|\Gamma_8(\Gamma_5);\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[(\epsilon_1-i\epsilon_2)\frac{\alpha}{\sqrt{2}}+\sqrt{2}\epsilon_3\beta\right], \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_5);\frac{1}{2}\right\rangle = -(\epsilon_1-i\epsilon_2)\frac{\beta}{\sqrt{2}}, \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_5);-\frac{1}{2}\right\rangle = (\epsilon_1+i\epsilon_2)\frac{\alpha}{\sqrt{2}}, \\ \left|\Gamma_8(\Gamma_5);-\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[-(\epsilon_1+i\epsilon_2)\frac{\beta}{\sqrt{2}}+\sqrt{2}\epsilon_3\alpha\right]. \end{cases} \quad (20)$$

В формулах (11), (14), (17) суммирование проводится по всем указанным представлениям оператора H_0. Фазовые множители у спин-орбитальных гармоник (12), (13), (15), (16), (18)–(20) выбраны таким образом, чтобы коэффициенты $C_{\Gamma_n\Gamma_\alpha}$ в (11), (14), (17) были вещественны.

Общий характер смешивания, описываемый формулами (11), (14), (17), говорит о том, что носители заряда в A_3B_5 имеют довольно сложную внутреннюю структуру, выходящую за рамки модели Кейна. Например, подмешивание состояний Γ_5 к Γ_1 в зоне проводимости Γ_6 означает, что электрон в общем случае не описывается волновой функцией s-типа, т. е. не является бесструктурной частицей со спином. Подмешивание состояний Γ_5 приводит к тому, что у электрона в расчете на элементарную ячейку появляется отличный от нуля орбитальный момент, который в принципе может влиять на поляризационные свойства частицы. Ранее этот факт не отмечался.

2. Правила отбора

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

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \mu(\boldsymbol{\sigma}\times\nabla V), \quad \mu = \frac{\hbar}{4mc^2}. \quad (21)$$

Матричные элементы вычисляются между всеми волновыми функциями в Γ-точке. Правила отбора формулируются в терминах коэффициентов Клебша–Гордана и приведенных матричных элементов. Приведенные матричные элементы выражаются через коэффициенты смешивания волновых функций. Такой подход представляется наиболее удобным для практических целей.[1]

Вычисления, проведенные с помощью волновых функций (11), (17), дают следующие правила отбора для переходов $\Gamma_6 \leftrightarrow \Gamma_8$:

$$\langle\Gamma_6;M|\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}|\Gamma_8;M'\rangle = k_{M'-M}C^{\frac{3}{2}M'}_{1\,M'-M\,\frac{1}{2}\,M}A^{\Gamma_6\Gamma_8}, \quad (22)$$

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

$$A^{\Gamma_6\Gamma_8} = \sum_{\Gamma_1\Gamma_4} C_{\Gamma_6\Gamma_1}C_{\Gamma_8\Gamma_4}\left[-i\langle s|p_x|x\rangle - \mu\left\langle s\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x\right\rangle\right]$$
$$+\sqrt{3}\sum_{\Gamma_3\Gamma_5} C_{\Gamma_6\Gamma_5}C_{\Gamma_8\Gamma_3}\left[i\langle\epsilon_1|p_x|x^2-y^2\rangle - \mu\left\langle\epsilon_1\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x^2-y^2\right\rangle\right]$$
$$+\frac{1}{\sqrt{3}}\sum_{\Gamma_5\Gamma_4} C_{\Gamma_6\Gamma_5}C_{\Gamma_8\Gamma_4}\left[i\langle\epsilon_3|p_y|x\rangle + 3\mu\left\langle\epsilon_3\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x\right\rangle\right]$$
$$+\sum_{\Gamma_5\Gamma_{5'}} C_{\Gamma_6\Gamma_5}C_{\Gamma_8\Gamma_{5'}}\left[-i\langle\epsilon_3|p_y|\epsilon_1'\rangle + \mu\left\langle\epsilon_3\left|\frac{\partial V}{\partial y}\right|\epsilon_1'\right\rangle\right]. \quad (23)$$

В формуле (22) k_α ($\alpha = 1,0,-1$) — циклические компоненты вектора $\mathbf{k}$ [16], $C^{JM}_{j_1\,m_1\,j_2\,m_2}$ — коэффициенты Клебша–Гордана.

Из соотношений (11), (14) следуют правила отбора для переходов $\Gamma_6 \leftrightarrow \Gamma_7$

$$\langle\Gamma_6;M|\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}|\Gamma_7;M'\rangle = k_{M'-M}C^{\frac{1}{2}M'}_{1\,M'-M\,\frac{1}{2}\,M}B^{\Gamma_6\Gamma_7}, \quad (24)$$

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

$$B^{\Gamma_6\Gamma_7} = \sum_{\Gamma_1\Gamma_4} C_{\Gamma_6\Gamma_1}C_{\Gamma_7\Gamma_4}\left[-i\langle s|p_x|x\rangle + 2\mu\left\langle s\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x\right\rangle\right]$$
$$+\sum_{\Gamma_5\Gamma_2} C_{\Gamma_6\Gamma_5}C_{\Gamma_7\Gamma_2}\left[i\langle\epsilon_1|p_x|s_1\rangle + 2\mu\left\langle\epsilon_1\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|s_1\right\rangle\right]$$
$$+\sum_{\Gamma_5\Gamma_4} C_{\Gamma_6\Gamma_5}C_{\Gamma_7\Gamma_4}\left[-\frac{2}{\sqrt{3}}i\langle\epsilon_3|p_y|x\rangle\right]. \quad (25)$$

[1] Формальные правила отбора, сформулированные в ряде руководств (см., например, [14,15]), не позволяют проследить связь матричных элементов с характером спин-орбитального смешивания.

Правила отбора для переходов $\Gamma_7 \leftrightarrow \Gamma_8$ формулируются с помощью соотношений (14), (17)

$$\langle\Gamma_7;M_1|\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}|\Gamma_8;M_2\rangle = \Big[-\sqrt{\frac{10}{3}}k_{+1}C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}M_2\,2\,1} + \sqrt{\frac{5}{3}}k_0\Big(C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}M_2\,2\,-2} - C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}M_2\,2\,2}\Big) + \sqrt{\frac{10}{3}}k_{-1}C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}M_2\,2\,-1}\Big]C^{\Gamma_7\Gamma_8}, \tag{26}$$

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

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = \sum_{\Gamma_2\Gamma_5} C_{\Gamma_7\Gamma_2}C_{\Gamma_8\Gamma_5}\Big[-i\langle s_1|p_x|\epsilon_1\rangle - \mu\Big\langle s_1\Big|\frac{\partial V}{\partial x}\Big|\epsilon_1\Big\rangle\Big] + \sum_{\Gamma_4\Gamma_3} C_{\Gamma_7\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_3}\Big[i\langle x|p_x|x^2-y^2\rangle - \mu\Big\langle x\Big|\frac{\partial V}{\partial x}\Big|x^2-y^2\Big\rangle\Big] + \sum_{\Gamma_4\Gamma_{4'}} C_{\Gamma_7\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}}\Big[i\langle x|p_y|z'\rangle - \mu\Big\langle x\Big|\frac{\partial V}{\partial y}\Big|z'\Big\rangle\Big] + \sum_{\Gamma_4\Gamma_5} C_{\Gamma_7\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_5}\Big[\frac{i}{\sqrt{3}}\langle x|p_y|\epsilon_3\rangle - \sqrt{3}\mu\Big\langle x\Big|\frac{\partial V}{\partial y}\Big|\epsilon_3\Big\rangle\Big]. \tag{27}$$

Правила отбора (22), (24), (26) характеризуются каждое одним параметром — приведенным матричным элементом. Это следует из формул для произведений представлений [5]

$$\Gamma_6 \times \Gamma_4 = \Gamma_8 + \Gamma_7, \quad \Gamma_7 \times \Gamma_4 = \Gamma_6 + \Gamma_8. \tag{28}$$

Приведенные матричные элементы (23), (25), (27) вещественны в силу вещественности коэффициентов смешивания $C_{\Gamma_n\Gamma_\alpha}$. Вывод правил отбора (22), (24), (26) дан в Приложении.

Переходы $\Gamma_8 \leftrightarrow \Gamma_{8'}$ в отличие от рассмотренных переходов характеризуются двумя параметрами. Это следует из соотношения

$$\Gamma_8 \times \Gamma_4 = 2\Gamma_8 + \Gamma_6 + \Gamma_7. \tag{29}$$

Используя волновые функции (17), можно получить следующие правила отбора для переходов $\Gamma_8 \leftrightarrow \Gamma_{8'}$:

$$\langle\Gamma_8;M|\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}|\Gamma_8;M'\rangle = \frac{1}{3}\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}(I^s)_{MM'} + \frac{1}{3}\mathcal{D}_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}(I^A)_{MM'}. \tag{30}$$

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

$$I^s = k_x\{J_x, J_y^2 - J_z^2\} + k_y\{J_y, J_z^2 - J_x^2\} + k_z\{J_z, J_x^2 - J_y^2\}, \tag{31}$$

$$I^A = i\big(k_x\{J_y, J_z\} + k_y\{J_z, J_x\} + k_z\{J_x, J_y\}\big), \tag{32}$$

где

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_z = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}. \tag{33}$$

В формулах (31), (32) символ $\{\dots\}$ означает антикоммутатор: $\{A, B\} = AB + BA$.

Приведенные матричные элементы $\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$ и $\mathcal{D}_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$ в (30) записываются следующим образом:

$$\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = -\sum_{\Gamma_3\Gamma_4}(C_{\Gamma_8\Gamma_3}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4} + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_3}C_{\Gamma_8\Gamma_4}) \times \Big[i\langle x^2-y^2|p_x|x\rangle + \mu\Big\langle x^2-y^2\Big|\frac{\partial V}{\partial x}\Big|x\Big\rangle\Big] - \sum_{\Gamma_4\Gamma_{4'}}(C_{\Gamma_8\Gamma_4}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}} + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}})\mu\Big\langle x\Big|\frac{\partial V}{\partial y}\Big|z'\Big\rangle + \sum_{\Gamma_5\Gamma_{5'}}(C_{\Gamma_8\Gamma_5}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{5'}} + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_5}C_{\Gamma_8\Gamma_{5'}})\mu\Big\langle \epsilon_3\Big|\frac{\partial V}{\partial y}\Big|\epsilon_1'\Big\rangle - \sqrt{3}\sum_{\Gamma_3\Gamma_5}(C_{\Gamma_8\Gamma_3}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_5} + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_3}C_{\Gamma_8\Gamma_5}) \times \Big[i\langle x^2-y^2|p_x|\epsilon_1\rangle + \mu\Big\langle x^2-y^2\Big|\frac{\partial V}{\partial x}\Big|\epsilon_1\Big\rangle\Big] + \frac{2}{\sqrt{3}}\sum_{\Gamma_4\Gamma_5}(C_{\Gamma_8\Gamma_4}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_5} + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_5})i\langle x|p_y|\epsilon_3\rangle. \tag{34}$$

$$\mathcal{D}_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = -\sum_{\Gamma_3\Gamma_4}(C_{\Gamma_8\Gamma_3}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4} - C_{\Gamma_{8'}\Gamma_3}C_{\Gamma_8\Gamma_4})$$
$$\times\left[i\langle x^2-y^2|p_x|x\rangle - 2\mu\left\langle x^2-y^2\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x\right\rangle\right]$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\Gamma_4\Gamma_{4'}}(C_{\Gamma_8\Gamma_4}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}} - C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}})i\left\langle x|p_y|z'\right\rangle$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\Gamma_5\Gamma_{5'}}(C_{\Gamma_8\Gamma_5}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{5'}} - C_{\Gamma_{8'}\Gamma_5}C_{\Gamma_8\Gamma_{5'}})i\langle\epsilon_1|p_y|\epsilon_3'\rangle$$
$$+\sqrt{3}\sum_{\Gamma_3\Gamma_5}(C_{\Gamma_8\Gamma_3}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_5} - C_{\Gamma_{8'}\Gamma_3}C_{\Gamma_8\Gamma_5})$$
$$\times\left[i\langle x^2-y^2|p_x|\epsilon_1\rangle - 2\mu\left\langle x^2-y^2\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|\epsilon_1\right\rangle\right]$$
$$+\frac{1}{\sqrt{3}}\sum_{\Gamma_4\Gamma_5}(C_{\Gamma_8\Gamma_4}C_{\Gamma_{8'}\Gamma_5} - C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4}C_{\Gamma_8\Gamma_5})i\langle x|p_y|\epsilon_3\rangle. \quad (35)$$

Величины $\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$, $\mathcal{D}_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}}$ вещественны и по отношению к перестановке символов Γ_8 и $\Gamma_{8'}$ удовлетворяют условиям симметрии и антисимметрии соответственно

$$\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = \mathcal{D}_s^{\Gamma_{8'}\Gamma_8}, \quad \mathcal{D}_A^{\Gamma_8\Gamma_{8'}} = -\mathcal{D}_A^{\Gamma_{8'}\Gamma_8}. \quad (36)$$

Из соотношений (36) следует, что внутризонные переходы характеризуются одним параметром $\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_8}$, поскольку $\mathcal{D}_A^{\Gamma_8\Gamma_8} = 0$.

Применительно к зоне проводимости Γ_6 и валентным зонам Γ_8, Γ_7 представляют интерес следующие связывающие их приведенные матричные элементы: $A^{\Gamma_6\Gamma_8}$, $B^{\Gamma_6\Gamma_7}$, $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$, $\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_8}$. Из формул (23), (25), (27), (34) следует, что если полагать волновые функции в зоне Γ_6 функциями s-типа, а в зонах Γ_8, Γ_7 — функциями p-типа, то в отсутствие смешивания

$$A^{\Gamma_6\Gamma_8} = B^{\Gamma_6\Gamma_7} = -i\langle s|p_x|x\rangle,\ C^{\Gamma_7\Gamma_8} = 0,\ \mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_8} = 0, \quad (37)$$

т. е. имеет место ситуация, постулируемая в модели Кейна [5]. Спин-орбитальное смешивание приводит к неравенству величин $A^{\Gamma_6\Gamma_8}$, $B^{\Gamma_6\Gamma_7}$ и к ненулевым матричным элементам $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$, $\mathcal{D}_s^{\Gamma_8\Gamma_8}$.

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

ПРИЛОЖЕНИЕ

Покажем справедливость выражений (22), (24), (26). Поскольку зависимость матричных элементов от проекций момента M, M' не связана с конкретным видом приведенных матричных элементов, удобно при формулировании правил отбора использовать волновые функции в простейшем виде. Будем считать, что волновые функции в зонах $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ имеют конкретную пространственную симметрию и записываются выражениями (12), (16), (18).

Введем обозначения для спиновых функций

$$\alpha = \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \quad \beta = \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \quad (\text{П}.1)$$

и для функций представления Γ_4

$$\psi_{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy),\ \psi_{10} = z,\ \psi_{1-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy). \quad (\text{П}.2)$$

Тогда волновые функции (16), (18) в зонах Γ_7 и Γ_8 можно представить следующим образом:

$$|\Gamma_7(\Gamma_4);M\rangle = \sum_{M_1M_2} C^{\frac{1}{2}M}_{1\,M_1\,\frac{1}{2}\,M_2}\psi_{1M_1}\chi_{\frac{1}{2}M_2}, \quad (\text{П}.3)$$

$$|\Gamma_8(\Gamma_4);M\rangle = \sum_{M_1M_2} C^{\frac{3}{2}M}_{1\,M_1\,\frac{1}{2}\,M_2}\psi_{1M_1}\chi_{\frac{1}{2}M_2}. \quad (\text{П}.4)$$

Здесь величины $C^{JM}_{j_1\,M_1\,j_2\,M_2}$ — коэффициенты Клебша–Гордана.

Записывая оператор $\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\pi}$ через ковариантные и контравариантные компоненты векторов в циклическом базисе [16], получаем

$$\langle\Gamma_6(\Gamma_1);m|\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\pi}|\Gamma_8(\Gamma_4);M\rangle$$
$$= \sum_{M_1M_2a} C^{\frac{3}{2}M}_{1\,M_1\,\frac{1}{2}\,M_2}\left\langle is\chi_{\frac{1}{2}m}|p^\alpha k_\alpha + \mu(\nabla V\times k)^\alpha\sigma_\alpha|\psi_{1M_1}\chi_{\frac{1}{2}M_2}\right\rangle$$
$$= k_{M-m}C^{\frac{3}{2}M}_{1\,M-m\,\frac{1}{2}\,m}A^{\Gamma_6\Gamma_8}, \quad (\text{П}.5)$$

$$A^{\Gamma_6\Gamma_8} = -i\langle s|p_x|x\rangle - \mu\left\langle s\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x\right\rangle \quad (\text{П}.6)$$

и аналогично

$$\Gamma_6(\Gamma_1);m|\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\pi}|\Gamma_7(\Gamma_4);M\rangle = k_{M-m}C^{\frac{1}{2}M}_{1\,M-m\,\frac{1}{2}\,m}B^{\Gamma_6\Gamma_7}, \quad (\text{П}.7)$$

$$B^{\Gamma_6\Gamma_7} = -i\langle s|p_x|x\rangle + 2\mu\left\langle s\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x\right\rangle. \quad (\text{П}.8)$$

При получении выражений (П.5), (П.7) были использованы следующие соотношения [16]:

$$p^\alpha = (-1)^\alpha p_{-\alpha}, \quad \langle s|p^\alpha|\psi_{1M_1}\rangle = \langle s|p_x|x\rangle\delta_{\alpha M_1},$$
$$(\nabla V\times k)^\alpha = i\sqrt{2}\sum_{\nu\lambda}C^{1\alpha}_{1\nu\,1\lambda}(\nabla V)^\nu k^\lambda, \quad \alpha,\nu,\lambda = \pm 1.0,$$
$$(\sigma_\alpha)_{mM_2} = \sqrt{3}C^{\frac{1}{2}m}_{\frac{1}{2}\,M_2\,1\,\alpha},$$
$$\langle s|\nabla V)^\nu|\psi_{1M_1}\rangle = \left\langle s\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|x\right\rangle\delta_{\nu M_1},$$
$$\sum_{M_1M_2\alpha}C^{JM}_{1\,M_1\,\frac{1}{2}\,M_2}C^{\frac{1}{2}m}_{\frac{1}{2}\,M_2\,1\,\alpha}C^{1\alpha}_{1\,M_1\,1\,\lambda}$$
$$= (-1)^{J+\frac{1}{2}+\lambda}\sqrt{6}C^{JM}_{1\,-\lambda\,\frac{1}{2}\,m}\begin{Bmatrix}1 & \frac{1}{2} & J\\ \frac{1}{2} & 1 & 1\end{Bmatrix}.$$

Здесь $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера, $\begin{Bmatrix}a & b & c\\ d & e & f\end{Bmatrix}$ — $6j$-символ. Приведенные матричные элементы $A^{\Gamma_6\Gamma_8}$ (П.6),

$B^{\Gamma_6\Gamma_7}$ (П.8) соответствуют конкретной пространственной симметрии волновых функций (12), (16), (18). В общем случае, когда функции $|\Gamma_6;M\rangle$, $|\Gamma_7;M\rangle$, $|\Gamma_8;M\rangle$ имеют вид (11), (14), (17), величины $A^{\Gamma_6\Gamma_8}$, $B^{\Gamma_6\Gamma_7}$ должны быть заменены выражениями (23), (25), в чем можно убедиться непосредственной проверкой, вычислив по какому-нибудь одному матричному элементу в (22) и (24).

Убедимся теперь в справедливости формул (26). Для этого вычислим вначале матричные элементы $\langle\Gamma_7(\Gamma_4);M|\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}|\Gamma_8(\Gamma_{4'});M'\rangle \equiv (\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{MM'}$. Получаем

$$\sqrt{3}(\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{\frac{1}{2}\,\frac{3}{2}} = -(\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}} = k_{-1}C^{\Gamma_7\Gamma_8},$$

$$(\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{\frac{1}{2}\,-\frac{3}{2}} = (\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{-\frac{1}{2}\,\frac{3}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}k_0C^{\Gamma_7\Gamma_8}, \qquad (\text{П.9})$$

$$\sqrt{3}(\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{-\frac{1}{2}\,-\frac{3}{2}} = -(\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}} = k_{+1}C^{\Gamma_7\Gamma_8},$$

$$(\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}} = (\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{-\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}} = 0,$$

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = -i\langle x|p_y|z'\rangle - \mu\left\langle x\left|\frac{\partial V}{\partial y}\right|z'\right\rangle. \qquad (\text{П.10})$$

Чтобы записать соотношения (П.9) через коэффициенты Клебша–Гордана, достаточно выразить через эти коэффициенты матричные элементы $\langle\Gamma_7(\Gamma_4);M|\mathbf{kp}|\Gamma_8(\Gamma_{4'});M'\rangle \equiv (\mathbf{kp})_{MM'}$, поскольку величины $(\mathbf{k}\boldsymbol{\pi})_{MM'}$ и $(\mathbf{kp})_{MM'}$ отличаются только приведенными матричными элементами. Из (П.3), (П.4) следует

$$(\mathbf{kp})_{MM'} = \sum_{M_1M_2m} C^{\frac{1}{2}M}_{1\,M_1\,\frac{1}{2}\,m}C^{\frac{3}{2}M'}_{1\,M_2\,\frac{1}{2}\,m}\langle\psi_{1M_1}|\mathbf{kp}|\psi'_{1M_2}\rangle. \quad (\text{П.11})$$

Матричные элементы в (П.11) можно связать с матрицей I размерности 3×3

$$\langle\psi_{1M_1}|\mathbf{kp}|\psi'_{1M_2}\rangle = i\langle x|p_y|z'\rangle(I)_{M_1M_2},\ M_1, M_2 = 1, 0, -1, \qquad (\text{П.12})$$

где

$$I = \begin{pmatrix} 0 & -k_{+1} & k_0 \\ -k_{-1} & 0 & k_{+1} \\ -k_0 & k_{-1} & 0 \end{pmatrix}. \qquad (\text{П.13})$$

Матрица I (П.13) может быть записана с помощью поляризационных операторов T_{2S} $(s{-}0, 1, 2)$ [16]

$$I = \sqrt{2}k_{+1}T_{21} + k_0(T_{2\,2} - T_{2-2}) - \sqrt{2}k_{-1}T_{2-1}. \quad (\text{П.14})$$

Учитывая, что в циклическом базисе матричные элементы операторов T_{2S} даются формулами [16]

$$(T_{2\,s})_{M_1M_2} = \sqrt{\frac{5}{3}}C^{1M_1}_{1\,M_2\,2\,s} \qquad (\text{П.15})$$

и принимая во внимание соотношение [16]

$$\sum_{M_1M_2m} C^{\frac{3}{2}M'}_{1\,M_2\,\frac{1}{2}\,m}C^{\frac{1}{2}M}_{1\,M_1\,\frac{1}{2}\,m}C^{1M_1}_{1\,M_2\,2\,s} = -C^{\frac{1}{2}M}_{\frac{3}{2}\,M'\,2\,s}, \qquad (\text{П.16})$$

можно получить из (П.14), (П.12), (П.11) выражение для матричного элемента $(\mathbf{kp})_{MM'}$. Если заменить в нем матричный элемент $i\langle x|p_y|z'\rangle$ на $C^{\Gamma_7\Gamma_8}$ (П.10), то в соответствии с (П.9) получим

$$\langle\Gamma_7(\Gamma_4);M|\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\pi}|\Gamma_8(\Gamma_{4'});M'\rangle = \left[-\sqrt{\frac{10}{3}}k_{+1}C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2\,2\,1} + \sqrt{\frac{5}{3}}k_0\left(C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2 2\,-2} - C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2 2\,2}\right) + \sqrt{\frac{10}{3}}k_{-1}C^{\frac{1}{2}M_1}_{\frac{3}{2}\,M_2 2\,-1}\right]C^{\Gamma_7\Gamma_8}. \qquad (\text{П.17})$$

В общем случае спин-орбитального смешивания, когда волновые функции записываются в виде (14), (17), выражение (П.17) переходит в (26) с приведенным матричным элементом (27). В этом можно убедиться, вычислив какой-нибудь один матричный элемент в левой части (26).

Список литературы

[1] M. Cardona, N.E. Christensen, G. Fasol. Phys. Rev. **B38**, *3*, 1806 (1988).
[2] C. Pryor. Phys. Rev. **B57**, *11*, 7190 (1998).
[3] O. Stier, M. Grundman, D. Bimberg. Phys. Rev. **B59**, *8*, 5688 (1999).
[4] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol. **1**, 249 (1957).
[5] G. Dresselhaus. Phys. Rev. **100**, *2*, 580 (1955).
[6] Оптические свойства полупроводников. Мир, М. (1970).
[7] Г.Н. Илуридзе, А.Н. Титков, Е.М. Чайкина. ФТП **21**, *1*, 80 (1987).
[8] В.Д. Дымников. III Всероссийская конференция по физике полупроводников. Тез. док. 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. **B60**, *8*, 5811 (1999).
[10] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, *4*, 1030 (1956).
[11] J.C. Hensel, K. Suzuki. Phys. Rev. Lett. **22**, 838 (1969).
[12] A.V. Subashiev, Yu.A. Mamaev, Yu.P. Yashin, J.E. Clendenin. Phys. Low-Dim. Struct. *1/2*, 1 (1999).
[13] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Квантовая электродинамика, Наука, М. (1989). С. 152.
[14] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).
[15] G.F. Koster, J.O. Dimmock, R.G. Wheeler, H. Statz. Properties of the thirty-two point grups. MII Press, Cambridge MA (1963).
[16] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалёв, В.К. Херсонский. Квантовая теория углового момента. Наука, Л. (1975).