03

Спин-зависимое внутри- и междолинное электрон-фононное рассеяние в германии

© Z. Liu[1], М.О. Нестоклон[2], J.L. Cheng[3], Е.Л. Ивченко[2], M.W. Wu[1]

[1] Hefei National Laboratory for Physical Sciences at Microscale and Department of Physics,
University of Science and Technology of China,
Hefei, Anhui, China
[2] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[3] Department of Physics and Institute for Optical Sciences, University of Toronto,
Toronto, Ontario, Canada
E-mail: nestoklon@coherent.ioffe.ru, mwwu@ustc.edu.cn

(Поступила в Редакцию 31 января 2013 г.)

Теоретически исследовано спин-зависимое электрон-фононное рассеяние в долинах L и Γ в кристаллах германия. С этой целью построен $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониан 16×16, корректно описывающий электронную дисперсию в окрестности L-точки германия в нижних зонах проводимости и верхних валентных зонах. Этот гамильтониан упрощает анализ спин-зависимых свойств электронов проводимости. Затем последовательно рассматривается рассеяние электронов на фононах внутри долин L и Γ, между долинами L и Γ и между различными долинами L. На основе метода инвариантов для каждого типа процессов строится матрица рассеяния, разложенная по степеням волновых векторов электрона, отсчитанных от центров долин. С помощью метода псевдопотенциала найдены численные коэффициенты в этих матрицах. Проанализированы парциальные вклады механизмов Эллиота и Яфета в спин-зависимое рассеяние электронов. Полученные результаты могут быть использованы для изучения оптической ориентации и релаксации горячих электронов в германии.

Работа поддержана программами РАН, грантами РФФИ и Президента РФ, Национальной программой фундаментальных исследований Китая в рамках гранта № 2012CB922002 и Исследовательской программой приоритетных стратегических исследований Китайской академии наук в рамках гранта № XDB01000000.

1. Введение

В настоящее время объемные материалы четвертой группы привлекают внимание в качестве многообещающих кандидатов для применений в устройствах спинтроники [1–21]. Механизм спиновой релаксации Дьяконова–Переля в этих материалах отсутствует из-за наличия у них центра пространственной инверсии, а сверхтонкое взаимодействие может быть подавлено путем изотопной очистки, что гарантирует относительно длинные времена спиновой релаксации [1,4,11,13,22–26]. То, что технология микропроизводства кремниевых приборов хорошо разработана и широко используется [4], дает существенное преимущество. Германий, будучи соседом кремния по IV группе, также характеризуется длительным временем сохранения спиновой когерентности и полностью совместим с развитой кремниевой микро- и наноэлектроникой [3,11,13,17]. Однако в отличие от кремния в деформированном германии проявляется ярко выраженный электрооптический эффект, так как ширины его прямой ($\Gamma-\Gamma$) и непрямой ($\Gamma-L$) запрещенных зон близки и лежат в инфракрасном диапазоне [12–20,27,28]. Таким образом, оптическая ориентация носителей, свободная от интерфейсных эффектов и влияния внешнего электрического поля, может быть эффективной в устройствах на основе германия [12,13,17,29]. Кроме того, большие по сравнению с кремнием длины спиновой диффузии из-за бо́льшей подвижности носителей тока помогают инжекции спина в Ge, а относительно сильное спин-орбитальное взаимодействие помогает в управлении спином [11,13,15,17,18]. Поэтому в последнее время вновь возрос интерес к германию как у экспериментаторов, так и у теоретиков. Лоре и др. [11,13] и Пеццоли и др. [17] экспериментально продемонстрировали оптическую инжекцию и детектирование поляризованных электронов и дырок в объемном германии и квантовых ямах, выращенных на основе германия. При этом электроны накачивались оптически в центр зоны Бриллюэна (Γ-долина) и быстро релаксировали по энергии в L-долины. Теоретически существенный прогресс был достигнут в понимании деталей структуры зоны проводимости и спин-зависимого электрон-фононного рассеяния [12,14,16,19]. В частности, с помощью метода инвариантов был построен компактный $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониан размерности 10×10, применимый в окрестности точки L [19,30–32]. Танг и др. [16] вывели правила отбора для электрон-фононного рассеяния в пределах одной L-долины и рассеяния между L-долинами и в методе сильной связи рассчитали соответствующие матричные элементы рассеяния. Ли и др. [19] получили матрицы рассеяния для переходов между L-долинами и акустического вклада во внутридолинное рассеяние в долине L. Для нахождения приближенной зависимости матрицы внутридолинного рассеяния от волнового вектора они использовали комбинацию $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-метода, метода псевдопотенциала и теории групп [33]. Недавно Ли и др. [20] также представили правила отбора для $\Gamma{-}L$ электрон-фононного рассеяния в зоне проводимости и рассчитали непрямые оптические переходы в германии с участием фононов. Тем не менее, насколько нам известно, для нескольких важных каналов электрон-фононного рассеяния матрицы рассеяния пока не проанализированы, например для рассеяния внутри Γ-долины и рассеяния в долине L и между долинами Γ и L с участием оптических фононов. Анализ этих механизмов рассеяния необходим для понимания спиновой динамики при оптической ориентации электронов в германии [11–13,17,20].

В настоящей работе мы совершенствуем описание зонной структуры германия вблизи минимумов зоны проводимости и изучаем рассеяние электронов на фононах в Γ- и L-долинах. Вначале получим спин-зависимый $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониан размерности 16×16 в окрестности L-точки из орбитальных базисных функций в этой точке [3,32]. Параметры гамильтониана: диагональные энергии, недиагональные матричные элементы спин-орбитального взаимодействия и оператора импульса — определяются из сравнения электронной дисперсии, найденной с использованием этого гамильтониана, с результатами расчета методом сильной связи $sp^3d^5s^*$. По сравнению с [19], где эффективные массы электронов считались заданными параметрами, мы стартуем с массы свободного электрона и получаем перенормировку масс из гамильтониана по теории возмущений. Таким образом получается зонная структура с тремя нижними зонами проводимости и двумя верхними валентными зонами. Найденные собственные состояния используются далее для количественного описания спиновых свойств электронов проводимости.

Как известно, матричные элементы междолинного рассеяния между точками экстремума $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}'_0$ можно найти, используя метод подгруппы [16,34–37]. Для нахождения их зависимости от начального ($\boldsymbol{\kappa}=\mathbf{k}-\mathbf{k}_0$) и конечного ($\boldsymbol{\kappa}'=\mathbf{k}'-\mathbf{k}'_0$) волновых векторов, отсчитанных от точек экстремума, предложены два альтернативных подхода [19,33,38,39]. В одном подходе начальное и конечное состояния электрона выражены в виде линейных комбинаций базисных функций $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-метода, разложенных по степеням $\boldsymbol{\kappa}$ и $\boldsymbol{\kappa}'$, вводится линеаризованный по колебаниям решетки микроскопический оператор электрон-фононного взаимодействия, матричные элементы рассеяния рассчитываются численно. В другом подходе, методе инвариантов, используется свойство инвариантности электрон-фононного взаимодействия относительно преобразований симметрии соответствующей пространственной группы [31,32]. Матричные элементы рассеяния записываются в виде матрицы размерности 2×2, получаемой из скалярных произведений псевдовектора с тремя компонентами в виде спиновых матриц Паули на псевдовекторы, линейные по амплитудам фононных колебаний и разложенные по степеням волновых векторов $\boldsymbol{\kappa}$ и $\boldsymbol{\kappa}'$. Коэффициенты при этих произведениях должны быть получены из сравнения с численными методами, такими как метод псевдопотенциала или сильной связи [30–32,38,39]. Очевидно, первый подход очень чувствителен к выбору собственных состояний в $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-методе, а второй не ограничен конкретным видом $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониана. Поэтому мы воспользуемся методом инвариантов и будем определять коэффициенты при инвариантах подгонкой к результатам нашего расчета методом псевдопотенциала.

Используя метод инвариантов, построим матрицы рассеяния и исследуем внутри- и междолинное рассеяние при учете состояний как в окрестности Γ-точки, так и в четырех L-долинах. При этом будут получены разложенные по степеням волнового вектора выражения для матричных элементов $\Gamma{-}\Gamma$, $L{-}L$ и $\Gamma{-}L$ рассеяния на поперечных и продольных акустических фононах, а также на оптических фононах. В связи с этим сразу заметим, что вклад нулевого порядка в рассеяние с переворотом спина отличен от нуля в междолинных переходах, но отсутствует во внутридолинных переходах. Затем исходя из используемых нами $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониана в L-точке и четырнадцатизонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониана в Γ-точке проанализируем по отдельности механизмы Эллиота [40] и Яфета [34] для таких процессов электрон-фононного рассеяния [41]. В каждом из рассмотренных случаев наши расчеты методом псевдопотенциала подтверждают полученные правила отбора и аналитическую зависимость матриц рассеяния от волнового вектора.

2. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониан

Начнем с построения спин-зависимого $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониана для описания электронных состояний вблизи минимума зоны проводимости германия в одной из четырех L-точек: $(\pi/a)(1,1,1)$, $(\pi/a)(-1,-1,1)$, $(\pi/a)(-1,1,1)$ и $(\pi/a)(1,-1,1)$, где a — постоянная решетки, равная 5.66 Å [3]. В каждой точке симметрия блоховских состояний описывается двойной группой D_{3d} с шестью неприводимыми представлениями L_4^+, L_5^+, L_6^+, L_4^-, L_5^- и L_6^- [3,30,42].

Проведем рассмотрение для окрестности точки $(\pi/a)(1,1,1)$; состояния в окрестности трех других точек получаются преобразованием симметрии, переводящим одну долину в другую. Для удобства выберем систему координат x,y,z с направлением оси z вдоль оси симметрии [111], так что базисные векторы $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$ этой системы связаны с базисными векторами $\hat{x}_0,\hat{y}_0,\hat{z}_0$ вдоль кристаллографических направлений [100], [010] и [001] соотношениями

$$\hat{x}=(\hat{x}_0-\hat{y}_0)/\sqrt{2},\quad \hat{y}=(\hat{x}_0+\hat{y}_0-2\hat{z}_0)/\sqrt{6},$$

$$\hat{z}=(\hat{x}_0+\hat{y}_0+\hat{z}_0)/\sqrt{3}.$$

Стартуя с нерелятивистских блоховских состояний $L_1, L_3, L^c_{3'}, L_{2'}$ в зоне проводимости и состояний $L^v_{3'}$ в

Таблица 1. Шестнадцать состояний в точке L: четыре в валентной зоне и двенадцать в зоне проводимости (первый столбец), примеры базисных функций для соответствующих спинорных представлений (второй столбец) и обозначения диагональных энергий, используемых в табл. 2 (третий столбец)

Зонные состояния	Базисные функции	$H_{0,jj}$
$\|v1\rangle = L_4^-(L_{3'}^v)$	$\frac{1}{2}[(x-\mathrm{i}y)\downarrow -(x+\mathrm{i}y)\uparrow]$	E_{45v}^-
$\|v2\rangle = L_5^-(L_{3'}^v)$	$\frac{1}{2}[(x-\mathrm{i}y)\downarrow +(x+\mathrm{i}y)\uparrow]$	E_{45v}^-
$\|v3\rangle = L_{6(1)}^-(L_{3'}^v)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)\downarrow \equiv L_{3'(1)}\downarrow$	E_{6v}^-
$\|v4\rangle = L_{6(2)}^-(L_{3'}^v)$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)\uparrow \equiv -L_{3'(2)}\uparrow$	E_{6v}^-
$\|c1\rangle = L_{6(1)}^+(L_1)$	$s\uparrow$	E_{6c}^+
$\|c2\rangle = L_{6(2)}^+(L_1)$	$s\downarrow$	E_{6c}^+
$\|c3\rangle = L_{6(2)}^+(L_3)$	$z(x-iy)\uparrow$; $i(x+iy)^2\uparrow$	$E_{6c'}^+$
$\|c4\rangle = L_{6(1)}^+(L_3)$	$-z(x+iy)\downarrow$; $i(x-iy)^2\downarrow$	$E_{6c'}^+$
$\|c5\rangle = L_4^+(L_3)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}z[(x-\mathrm{i}y)\downarrow +(x+\mathrm{i}y)\uparrow]$;	E_{45c}^+
	$\frac{i}{\sqrt{2}}[-(x-iy)^2\uparrow +(x+iy)^2\downarrow]$	
$\|c6\rangle = L_5^+(L_3)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}z[(x-\mathrm{i}y)\downarrow -(x+\mathrm{i}y)\uparrow]$;	E_{45c}^+
	$\frac{i}{\sqrt{2}}[(x-iy)^2\uparrow +(x+iy)^2\downarrow]$	
$\|c7\rangle = L_4^-(L_{3'}^c)$	те же, что в случае $L_4^-(L_{3'}^v)$	E_{45c}^-
$\|c8\rangle = L_5^-(L_{3'}^c)$	см. $L_5^-(L_{3'}^v)$	E_{45c}^-
$\|c9\rangle = L_{6(1)}^-(L_{3'}^c)$	см. $L_{6(1)}^-(L_{3'}^v)$	E_{6c}^-
$\|c10\rangle = L_{6(2)}^-(L_{3'}^c)$	см. $L_{6(2)}^-(L_{3'}^v)$	E_{6c}^-
$\|c11\rangle = L_{6(1)}^-(L_{2'})$	$z\uparrow$	$E_{6c'}^-$
$\|c12\rangle = L_{6(2)}^-(L_{2'})$	$z\downarrow$	$E_{6c'}^-$

валентной зоне, получаем 16 спинорных блоховских функций, которые перечислены в табл. 1. Именно этот набор блоховских функций в L-точке используется для построения $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониана и анализа электрон-фононного рассеяния. В этой же таблице для удобства приведены примеры простейших базисных функций, преобразующихся по соответствующим неприводимым спинорным представлениям. Из-за наличия в решетке германия центра пространственной инверсии базисные функции характеризуются определенной четностью, верхние индексы „+“ и „–“ указывают на четные и нечетные функции соответственно. В силу симметрии к обращению времени все зонные состояния двукратно вырождены [3].

Гамильтониан теории возмущений с учетом спин-зависимых слагаемых дается выражением [42,43]

$$\Delta H = \frac{\hbar}{4m_e^2c^2}[\boldsymbol{\nabla} V_0(\mathbf{r})\times\mathbf{p}]\cdot\boldsymbol{\sigma} + \frac{\hbar\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\pi}}{m_e} + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_e}, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\kappa}$ — волновой вектор электрона относительно точки L, первое слагаемое описывает спин-орбитальное взаимодействие при $\boldsymbol{\kappa}=0$, m_e — масса свободного электрона, $V_0(\mathbf{r})$ — не зависящий от спина периодический потенциал, $\boldsymbol{\pi}$ — обобщенный оператор импульса [31,43],

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \delta\boldsymbol{\pi}, \quad \delta\boldsymbol{\pi} = \frac{\hbar}{4m_ec^2}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\nabla} V_0(\mathbf{r}). \quad (2)$$

В матричном виде релятивистский $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониан может быть записан в виде суммы трех слагаемых

$$H = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_e}\hat{I} + H_0 + H_{\boldsymbol{\kappa\pi}}, \quad (3)$$

где $\hat{I}$ — единичная матрица размерности 16×16, H_0 — матрица гамильтониана в точке L; $H_{\boldsymbol{\kappa\pi}}$ — линейный по $\boldsymbol{\kappa}$ вклад, описывающий межзонное $\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\pi}$-смешивание. Диагональные компоненты H_0 представлены в третьем столбце табл. 1. Матрица H_0 имеет также недиагональные компоненты, ответственные за межзонное спин-орбитальное смешивание, которое возможно только между состояниями, преобразующимися по эквивалентным спинорным представлениям.

Десять ненулевых недиагональных компонент, которые происходят из первого слагаемого в правой части формулы (1), определяются четырьмя линейно независимыми параметрами

$$\begin{aligned}
&\langle v4|H_0|c12\rangle = \langle v3|H_0|c11\rangle = \Delta_1,\\
&\langle c1|H_0|c4\rangle = \langle c2|H_0|c3\rangle = \Delta_2,\\
&\langle c9|H_0|c11\rangle = \langle c10|H_0|c12\rangle = \Delta_3,\\
&\langle v4|H_0|c10\rangle = \langle v3|H_0|c9\rangle\\
&\qquad = -\langle v2|H_0|c8\rangle = -\langle v1|H_0|c7\rangle = \Delta_4. \quad (4)
\end{aligned}$$

Еще десять матричных элементов получаются операцией транспонирования. Здесь Δ_l $(l=1,2,3,4)$ — вещественные зонные параметры, значения которых приведены в табл. 2.

Линейный по $\boldsymbol{\kappa}$ вклад в гамильтониан (3) может быть представлен в виде

$$H_{\boldsymbol{\kappa\pi}} = \begin{bmatrix} H_{\rm cc} & H_{\rm vc}^\dagger \\ H_{\rm vc} & 0 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

где $H_{\rm cc}$ и $H_{\rm vc}$ — блоки 12×12 и 4×12 соответственно. Поскольку матричные элементы оператора $\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\pi}$ между состояниями с одинаковой четностью обращаются в нуль, эти блоки могут быть записаны в виде

$$H_{\rm cc} = \begin{bmatrix} 0 & H_{\rm cc}^{+-} \\ H_{\rm cc}^{-+} & 0 \end{bmatrix}, \quad H_{\rm vc} = \begin{bmatrix} 0 & H_{\rm vc}^{-+} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

где $H_{\rm cc}^{+-} = (H_{\rm cc}^{-+})^\dagger$, $H_{\rm cc}^{-+}$ — матрица 6×6, составленная из матричных элементов между нечетными и четными состояниями зоны проводимости, а матрица $H_{\rm vc}^{-+}$ составлена из матричных элементов между четырьмя состояниями в валентной зоне и шестью четными состояниями в зоне проводимости. Используя правила отбора для матричных элементов между орбитальными состояниями $L_1, L_3, L^c_{3'}, L_{2'}$ и $L^v_{3'}$, получаем для оператора $\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{p}$

$$H^{+-}_{\rm cc}(\boldsymbol{\kappa}\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} P_6\kappa_+ & -P_6\kappa_- & Q_2\kappa_+ & -Q_2\kappa_- & 0 & P_5\kappa_z \\ P_6\kappa_+ & P_6\kappa_- & -Q_2\kappa_+ & -Q_2\kappa_- & P_5\kappa_z & 0 \\ -\sqrt{2}P_6\kappa_- & 0 & 0 & -P_5\kappa_z & -Q_2\kappa_+ & -Q_2\kappa_+ \\ 0 & \sqrt{2}P_6\kappa_+ & -P_5\kappa_z & 0 & -Q_2\kappa_- & Q_2\kappa_- \\ P_4\kappa_z & 0 & 0 & \sqrt{2}P_3\kappa_+ & P_3\kappa_- & P_3\kappa_- \\ 0 & P_4\kappa_z & -\sqrt{2}P_3\kappa_- & 0 & P_3\kappa_+ & -P_3\kappa_+ \end{pmatrix}, \tag{7}$$

$$H^{-+}_{\rm vc}(\boldsymbol{\kappa}\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} P_2\kappa_z & 0 & -Q_1\kappa_- & Q_1\kappa_+ & P_1\kappa_+ & -P_1\kappa_- \\ 0 & P_2\kappa_z & -Q_1\kappa_- & -Q_1\kappa_+ & P_1\kappa_+ & P_1\kappa_- \\ -Q_1\kappa_+ & -Q_1\kappa_+ & -P_2\kappa_z & 0 & \sqrt{2}P_1\kappa_- & 0 \\ Q_1\kappa_- & -Q_1\kappa_- & 0 & -P_2\kappa_z & 0 & -\sqrt{2}P_1\kappa_+ \end{pmatrix}, \tag{8}$$

где $\kappa_\pm = \kappa_x \pm i\kappa_y$. Для матрицы $H^{+-}_{\rm cc}$ мы используем базисные „бра"- и „кет"-состояния в следующем порядке: $c6\dots c1$ и $c12\dots c7$, а для матрицы $H^{-+}_{\rm vc}$ — состояния „бра" в порядке от $v1$ до $v4$ и „кет" от $c6$ до $c1$. Дополнительный вклад от оператора $\boldsymbol{\kappa}\cdot\delta\boldsymbol{\pi}$ имеет вид

$$\delta H_{\rm cc} = \begin{pmatrix} \alpha_6\kappa_+ & -\alpha_6\kappa_- & (\beta_2+\alpha_5)\kappa_+ & (-\beta_2-\alpha_5)\kappa_- & 0 & 2\sqrt{2}\beta_2\kappa_z \\ \alpha_6\kappa_+ & \alpha_6\kappa_- & (-\beta_2+\alpha_5)\kappa_+ & (-\beta_2+\alpha_5)\kappa_- & -2\sqrt{2}\beta_2\kappa_z & 0 \\ \sqrt{2}\alpha_6\kappa_- & 2\sqrt{2}\alpha_6\kappa_z & 0 & 0 & (\beta_2+\alpha_5)\kappa_+ & (\beta_2-\alpha_5)\kappa_+ \\ 2\sqrt{2}\alpha_6\kappa_z & -\sqrt{2}\alpha_6\kappa_+ & 0 & 0 & (\beta_2+\alpha_5)\kappa_- & (-\beta_2+\alpha_5)\kappa_- \\ 0 & \alpha_4\kappa_+ & -2\sqrt{2}\alpha_3\kappa_z & -\sqrt{2}\alpha_3\kappa_+ & \alpha_3\kappa_- & \alpha_3\kappa_- \\ -\alpha_4\kappa_- & 0 & \sqrt{2}\alpha_3\kappa_- & -2\sqrt{2}\alpha_3\kappa_z & \alpha_3\kappa_+ & -\alpha_3\kappa_+ \end{pmatrix},$$

$$\delta H_{\rm vc} = \begin{pmatrix} 2\sqrt{2}\beta_1\kappa_z & 0 & (\beta_1+\alpha_2)\kappa_- & (-\beta_1-\alpha_2)\kappa_+ & \alpha_1\kappa_+ & -\alpha_1\kappa_- \\ 0 & -2\sqrt{2}\beta_1\kappa_z & (\beta_1-\alpha_2)\kappa_- & (\beta_1-\alpha_2)\kappa_+ & \alpha_1\kappa_+ & \alpha_1\kappa_- \\ (-\beta_1+\alpha_2)\kappa_+ & (-\beta_1-\alpha_2)\kappa_+ & 0 & 0 & -\sqrt{2}\alpha_1\kappa_- & -2\sqrt{2}\alpha_1\kappa_z \\ (\beta_1-\alpha_2)\kappa_- & (-\beta_1-\alpha_2)\kappa_- & 0 & 0 & -2\sqrt{2}\alpha_1\kappa_z & \sqrt{2}\alpha_1\kappa_+ \end{pmatrix}. \tag{9}$$

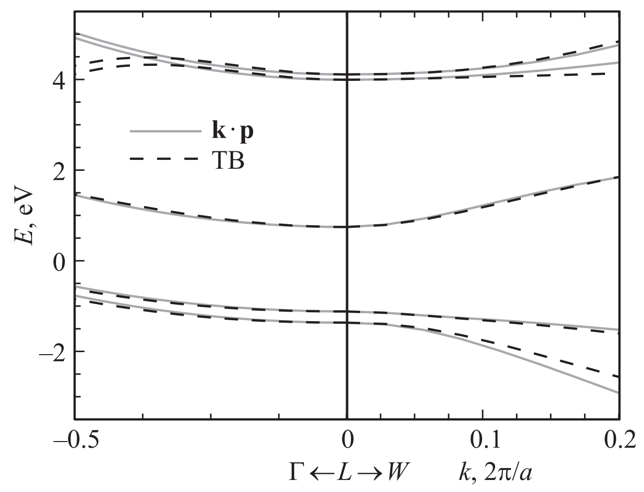
Здесь $P_1, P_2\dots$ и $\alpha_1, \alpha_2\dots$ — чисто мнимые коэффициенты, а коэффициенты Q_1, Q_2, β_1 и β_2 вещественны. Их значения приведены в табл. 2.

Поясним процедуру построения матриц (7)–(9) на примере матричных элементов между блоховскими функциями $\Psi_{j'} = L_4^-, L_5^-, L^-_{6(1)}, L^-_{6(2)}$ и $\Phi_j = L_4^+, L_5^+, L^+_{6(1)}, L^+_{6(2)}$ соответственно для $j', j = 1, 2, 3, 4$, сформированными из орбитальных базисных функций, преобразующихся по векторным представлениям $L_{3'}$ и L_3 (табл. 1). Выбираем согласно этой таблице конкретный вид базисных функций $|L_{3'}, i'\rangle$ $(i' = 1, 2)$ и $|L_3, i\rangle$ $(i = 1, 2)$, а затем вычисляем с использованием симметрийного анализа матричные элементы операторов $\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{p}$ и $U_\alpha = (\hbar/4m_ec^2)\,[\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r})\times\boldsymbol{\kappa}]_\alpha$ между ними. Обозначим эти матричные элементы в виде $M_{i'i}$ и $U_{\alpha;i'i}$. Далее, состояния $\Psi_{j'}$ и Φ_j записываются в виде линейных комбинаций $\sum\limits_{i's'} C_{j',i's'}\alpha_{s'}\,|L_{3'}, i'\rangle$ и $\sum\limits_{is} C_{j,is}\alpha_s\,|L_3, i\rangle$, где α_s — состояние со спином вверх $\uparrow$ для $s = 1/2$ и со спином вниз $\downarrow$ для $s = -1/2$ (по отношению к оси [111]). Тогда матричные элементы между спинорными состояниями даются выражениями

$$\langle\Psi_{j'}|\boldsymbol{\kappa}\mathbf{p}|\Phi_j\rangle = \sum_{i'is} C^*_{j',i's}M_{i'i}C_{j,is}\ ,$$

$$\langle\Psi_{j'}|\boldsymbol{\kappa}\,\delta\boldsymbol{\pi}|\Phi_j\rangle = \sum_{i'is's} C^*_{j',i's'}(\mathbf{U}_{i'i}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{s's})C_{j,is}\ .$$

Для остальных трех L-точек: $(\pi/a)(-1,-1,1)$, $(\pi/a)(-1,1,1)$ и $(\pi/a)(1,-1,1)$ — базисные функции и гамильтониан аналогичны тем, которые приведены в табл. 1 (см. обсуждение в Приложении), а также в формуле (5), но координатные системы для них различаются.



Электронная дисперсия в нижних зонах проводимости и верхних валентных зонах в направлениях от точки L к центру зоны Бриллюэна Γ и к точке W. Начало отсчета для волнового вектора (нулевая точка на рисунке) взято в точке $(\pi/a)(1,1,1)$. Сплошные кривые представляют результаты, полученные $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-методом. Штриховые кривые рассчитаны в $sp^3d^5s^*$ методом сильной связи (TB) [28].

Приведенные в табл. 2 значения $\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{p}$-параметров находились путем подгонки к модели сильной связи $sp^3d^5s^*$ [28]. Из рисунка видно, что три нижние зоны проводимости и две верхние валентные зоны, рассчитанные для этих значений, идеально описывают результаты, полученные методом сильной связи. Следует отметить, что матричный $\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониан размерности не менее 12×12 необходим для того, чтобы описать структуру нижних зон проводимости и верхних валентных зон без привлечения далеких зон во втором порядке теории возмущений. Такая зонная структура применима также для адекватного описания релаксации электронного спина при электрон-фононном рассеянии.

Таблица 2. Параметры $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-гамильтониана 16×16 вблизи L-точки

Параметр	Значение, eV · nm	Параметр	Значение, eV
Q_1	0.52	E^-_{45v}	−1.119
Q_2	0.26	E^-_{6v}	−1.365
P_1	$0.52i$	E^+_{6c}	0.747
P_2	$0.32i$	$E^+_{6c'}$	3.990
P_3	$0.31i$	E^+_{45c}	4.110
P_4	$0.37i$	E^-_{45c}	8.349
P_5	$-0.35i$	E^-_{6c}	8.354
P_6	$-0.20i$	$E^-_{6c'}$	9.109
β_1	0.03	Δ_1	0.012
β_2	0.01	Δ_2	0.089
α_1	$-0.01i$	Δ_3	0.041
α_2	$0.02i$	Δ_4	0.097
α_3	$0.02i$		
α_4	$0.04i$		
α_5	$0.04i$		
α_6	$0.02i$		

Для нахождения эффективных масс в L-долине используются второй порядок теории возмущений и стандартные формулы для продольной и поперечной эффективных масс [31,42]

$$\frac{m_e}{m_l^i}=1+\frac{2m_e}{\hbar^2}\sum_{j\neq i}\frac{|H_{ij}|^2_{k_x,k_y=0}}{(E_i-E_j)k_z^2}, \tag{10a}$$

$$\frac{m_e}{m_t^i}=1+\frac{2m_e}{\hbar^2}\sum_{j\neq i}\frac{|H_{ij}|^2_{k_z,k_y=0}}{(E_i-E_j)k_x^2}. \tag{10b}$$

Здесь i, j — собственные состояния матрицы H_0; H_{ij} — матричные элементы оператора $H_{\boldsymbol{\kappa\pi}}$, между этими состояниями. Учитывая отличные от нуля матричные элементы оператора H_0 (4), легко построить собственные состояния нижней зоны проводимости L_6^+ в L-точке

$$\varphi_{L_6^+,1/2}=\frac{1}{A}\,[L^+_{6(1)}(L_1)-cL^+_{6(1)}(L_3)]$$
$$=\frac{1}{A}\,[L_1\uparrow+\mathrm{i}c(L_{3x}+\mathrm{i}L_{3y})\downarrow],$$
$$\varphi_{L_6^+,-1/2}=\frac{1}{A}\,[L^+_{6(2)}(L_1)-cL^+_{6(2)}(L_3)]$$
$$=\frac{1}{A}\,[L_1\downarrow+\mathrm{i}c(L_{3x}-\mathrm{i}L_{3y})\uparrow], \tag{11}$$

в которых спиновые состояния $\uparrow$ и $\downarrow$ частично смешаны. Здесь A — нормировочный коэффициент; c — вещественный коэффициент, пропорциональный константе Δ_2; L_1 — орбитальная (нерелятивистская) блоховская функция в нижней зоне проводимости, функции L_{3x} и L_{3y} преобразуются по тому же представлению, что и функции $-zy$, zx (табл. 1). В настоящей работе функции L_1, L_{3x} и L_{3y} выбраны вещественными. Для нижней зоны проводимости получается значение для продольной эффективной массы $m_l=1.36\,m_e$, заметный вклад в него вносит четвертая зона проводимости $L_{2'}$ [28].

3. Электрон-фононное рассеяние

Перейдем к рассмотрению электрон-фононного рассеяния в германии, как внутридолинного в долинах L и Γ, так и междолинного: между двумя различными L-долинами или при переходах $\Gamma{-}L$. Изучение этих типов рассеяния необходимо для понимания спиновой динамики оптической ориентации и релаксации горячих электронов [13,16,44,45]. Проанализируем вклады механизмов Яфета [34] и Эллиота [40] в процессы с переворотом спина при таких электрон-фононных переходах. Коэффициенты в матрицах рассеяния, полученных методом инвариантов, находятся с помощью метода псевдопотенциала, который служит также независимой проверкой правил отбора и зависимости вероятности рассеяния от волнового вектора.

Сначала приведем ограничения, накладываемые симметрией к обращению времени на зависимость матрицы рассеяния от волнового вектора [46]. Как любая матрица 2×2, спин-зависимая матрица рассеяния из состояния с волновым вектором $\mathbf{k}$ в состояние $\mathbf{k}'$ может быть записана в виде линейной суперпозиции единичной матрицы $\hat{I}$ размерности 2×2 и матриц Паули

$$\hat{M}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}\,\hat{I} + \mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \tag{12}$$

Такое описание предполагает, что спиновое смешивание как в начальном, так и конечном состоянии невелико, как это имеет место, например, для состояний вблизи дна зоны проводимости L_6^+ или Γ_7^- в германии. В этом случае каждому состоянию можно приписывать определенную проекцию спина $\pm 1/2$, а примесь противоположной проекции учитывать при расчете спин-зависимого вклада в (12), пропорционального псевдовектору $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$. В случае междолинного рассеяния нужно проследить, чтобы доминирующие спиновые состояния $\uparrow$, $\downarrow$ в начальном и конечном состояниях соответствовали одной и той же системе декартовых координат. Из эрмитовости оператора электрон-фононного взаимодействия и его симметрии к обращению времени следуют соотношения

$$A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = A^*_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = A_{-\mathbf{k},-\mathbf{k}'}, \tag{13a}$$

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \mathbf{B}^*_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = -\mathbf{B}_{-\mathbf{k},-\mathbf{k}'}. \tag{13b}$$

Матрица (12) позволяет найти амплитуду рассеяния с сохранением и переворотом спина при любой ориентации начального спина. Пусть, например, исходный спин ориентирован вдоль единичного вектора $\hat{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$, задаваемого полярными углами θ и ϕ в системе координат x, y, z. Выбирая фазы спинового столбца этого состояния, а также состояние с противоположным направлением спина в виде

$$C_\uparrow(\theta,\phi) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\phi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi/2} \end{pmatrix},$$

$$C_\downarrow(\theta,\phi) = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\phi/2} - \\ \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi/2} \end{pmatrix},$$

получаем

$$M_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\uparrow,\uparrow} = A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}\cos\theta + (B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};x}\cos\phi + B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};y}\sin\phi)\sin\theta, \tag{14a}$$

$$M_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\downarrow,\uparrow} = -B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}\sin\theta + (B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};x}\cos\phi + B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};y}\sin\phi) \times \cos\theta + i\,(-B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};x}\sin\phi + B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};y}\cos\phi). \tag{14b}$$

Матричные элементы $M_{\mathbf{k}',\mathbf{k};s',s}$ междолинного рассеяния можно представить в виде разложения в ряд Тейлора

$$M_{\mathbf{k}',\mathbf{k};s',s} = D^{(0)}_{s',s} + \mathbf{D}^{(1a)}_{s',s} \cdot \delta\mathbf{q} + \mathbf{D}^{(1b)}_{s',s} \cdot \delta\mathbf{K} + \delta\mathbf{q} \cdot \mathbf{D}^{(2a)}_{s',s} \cdot \delta\mathbf{q} + \delta\mathbf{q} \cdot \mathbf{D}^{(2b)}_{s',s} \cdot \delta\mathbf{K} + \dots \tag{15}$$

по степеням векторов

$$\delta\mathbf{q} = (\mathbf{k}' - \mathbf{k}_\mathrm{f}) - (\mathbf{k} - \mathbf{k}_\mathrm{i}), \quad \mathbf{K} = (\mathbf{k}' - \mathbf{k}_\mathrm{f}) + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_\mathrm{i}), \tag{16}$$

где $\mathbf{k}_\mathrm{i}$, $\mathbf{k}_\mathrm{f}$ — точки экстремума в долинах начального и конечного состояний, $|\delta\mathbf{q}|, |\mathbf{K}|$ считаются малыми по сравнению с $2\pi/a$ [16,33,47]. Для междолинного рассеяния как с сохранением, так и с переворотом спина слагаемые нулевого порядка в (15) не равны нулю. Ограничимся в разложении (15) квадратичными слагаемыми при расчете внутридолинных переходов и линейными слагаемыми для междолинных переходов.

3.1. Метод численного расчета

В следующих подразделах нами используется метод инвариантов для вывода зависимости матриц рассеяния от волнового вектора и спина электрона и от сорта фононов. Для оценки свободных коэффициентов в этих матрицах записываем электрон-фононное взаимодействие, используя эмпирический метод псевдопотенциала, и численно находим матричные элементы рассеяния. Этот метод был успешно использован для расчета времени спиновой релаксации [48], степени циркулярной поляризации люминесценции при непрямых оптических переходах [49] и непрямой оптической инжекции [50] в объемном кремнии и продемонстрировал хорошее согласие с экспериментальными данными. В используемом методе в микроскопическом одночастичном потенциале $V(\mathbf{r}) = \sum_{i\alpha} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i\alpha})$ вклад α-го атома в примитивной ячейке i заменяется плавным псевдопотенциалом $\tilde{v}(\mathbf{r}) = v_L(\mathbf{r}) + v_{NL}(\mathbf{r}) + v_{so}(r)\ \ \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, который включает локальный потенциал v_L, нелокальный потенциал v_NL и спин-орбитальную часть v_so; $\mathbf{l}$ — оператор орбитального момента. Псевдопотенциал выбран так, чтобы получать те же одночастичные энергии, что и в реальном кристаллическом потенциале, с волновыми функциями более гладкими вблизи центра ядер. При выборе псевдопотенциала мы пользовались значениями из [51]. Рассчитанные энергии электрона на дне зоны проводимости в точках Γ и L совпадают с рассчитанными в модели сильной связи $sp^3d^5s^*$ [28]. Сдвигая положение атома $\mathbf{R}_{i\alpha}$ на векторы смещения узлов кристаллической решетки $\mathbf{u}_{i\alpha}$ и разлагая $V(\mathbf{r})$ по степеням $\mathbf{u}_{i\alpha}$, из линейных слагаемых в этом разложении получаем электрон-фононное взаимодействие H_{ep}. Дисперсия и векторы поляризации фононов описывались в модели адиабатического заряда на связи [52]. Рассчитанные энергии фононов, участвующих в различных каналах междолинного рассеяния, составляют соответственно 10.2, 28.6 и 33.3 meV для X_3-, X_1- и X_4-фононов и 7.4, 25.6, 29.3 и 35.8 meV для L_3-, $L_{2'}$-, L_1-, и $L_{3'}$-фононов.

С помощью метода псевдопотенциала были также определены матричные элементы электрон-фононного взаимодействия в германии для переходов внутри долин Γ и L, между долинами Γ и L и между различными L-долинами, которые подтвердили правила отбора и вид матриц рассеяния для всех рассмотренных далее случаев. Коэффициенты, входящие в матрицы рассеяния и полученные путем подгонки к результатам микроскопического расчета, приведены в табл. 3–7. Определение этих коэффициентов дано в следующих подразделах. Как и следовало ожидать, значения матричных элементов для процессов с сохранением спина существенно больше, чем для процессов с переворотом спина (более чем в 50 раз).

3.2. Внутридолинное рассеяние

Применим теорию инвариантов для рассмотрения внутридолинного электрон-фононного рассеяния в германии на продольных акустических (LA), поперечных акустических (TA) и оптических (OP) фононах [31,32]. При этом акустические колебания решетки описываются тензором деформации $u_{\alpha\beta} = (\partial u_\alpha/\partial r_\beta + \partial u_\beta/\partial r_\alpha)/2$, где $\mathbf{u}$ — смещение центра тяжести элементарной ячейки при деформации. В группе O_h шесть линейно независимых компонент тензора деформации преобразуются по представлениям $A_1^+ + E^+ + F_2^+$ (в обозначениях [31]). При анализе симметрии взаимодействия к операции инверсии времени компоненты $u_{\alpha\beta}$ считаются вещественными и инвариантными к этой операции. Оптические колебания в Γ-точке зоны Бриллюэна трехкратно вырождены и преобразуются по представлению $\Gamma_{25'}$ пространственной группы O_h^7. При построении матричных элементов рассеяния на оптических фононах вместо линейных по $u_{\alpha\beta}$ членов ищутся инварианты, линейные по амплитуде оптических колебаний $\mathbf{U}_{\mathrm{OP}}$.

Амплитуды квантованных колебаний решетки учитываются заменой $\mathbf{u}$ или $\mathbf{U}_{\mathrm{OP}}$ векторами

$$\mathbf{A} = \mathscr{A}\boldsymbol{\xi}, \quad \mathscr{A} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}}\left(n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)}, \tag{17}$$

где $\mathbf{q}$, $\boldsymbol{\xi}$ — волновой вектор и единичный вектор поляризации фонона, $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ при испускании фонона и $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$ при его поглощении; ρ, V, $\omega_{\mathbf{q}}$ и $n_{\mathbf{q}}$ — соответственно плотность и объем кристалла, частота и число заполнения, для краткости записи индекс фононной моды ν опущен.

Заметим, что для германия общий симметрийный анализ процессов с переворотом спина уже был проведен, в результате было показано, что основные слагаемые для акустических фононов имеют третий порядок по волновым векторам (с учетом волнового вектора в выражении для $u_{\alpha\beta}$), а слагаемые для оптических фононов — второй порядок [19,33,34].

Наличие операции пространственной инверсии в группах O_h и D_{3d} и четность как тензора деформаций $u_{\alpha\beta}$, так и оптических колебаний $\Gamma_{25'}$ накладывают на коэффициенты в (12) дополнительные условия четности

$$A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = A_{-\mathbf{k}',-\mathbf{k}}, \quad B_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = B_{-\mathbf{k}',-\mathbf{k}}. \tag{18}$$

Комбинируя эти условия с соотношениями (13), получаем, что коэффициенты $A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ вещественны, а коэффициенты $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ чисто мнимые. В разложения этих коэффициентов по степеням волновых векторов $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}$ входят только четные произведения их компонент. При этом разложение $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ начинается с квадратичных членов, которые представляют собой произведения компонент вектора $\mathbf{q} = \pm(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ и вектора $\mathbf{K} = \mathbf{k}' + \mathbf{k}$. Для доказательства последнего утверждения введем операции перестановок $\mathbf{k}', \mathbf{k} \to \mathbf{k}, \mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}', \mathbf{k} \to -\mathbf{k}, -\mathbf{k}'$, обозначив их символами $\mathscr{P}_1$ и $\mathscr{P}_2$ соответственно. При перестановке $\mathscr{P}_1$ компоненты q_α меняют знак, а компоненты K_β не меняются. Поэтому имеем $\mathscr{P}_1(\mathrm{i}q_\alpha K_\beta)^* = -\mathrm{i}\mathscr{P}_1(q_\alpha K_\beta) = \mathrm{i}q_\alpha K_\beta$ в согласии с (13) и мнимостью $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$. При перестановке $\mathscr{P}_2$ компоненты q_α не меняются, а компоненты K_β меняют знак, и, значит, $\mathscr{P}_2(q_\alpha K_\beta) = -q_\alpha K_\beta$ в согласии с (13). В то же время $\mathscr{P}_1(\mathrm{i}q_\alpha q_\beta)^* = -\mathrm{i}q_\alpha q_\beta$, $\mathscr{P}_1(\mathrm{i}K_\alpha K_\beta)^* = -\mathrm{i}K_\alpha K_\beta$ и $\mathscr{P}_2(q_\alpha q_\beta) = q_\alpha q_\beta$, $\mathscr{P}_2(K_\alpha K_\beta) = K_\alpha K_\beta$, что не удовлетворяет свойству (13) для коэффициентов $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$.

3.2.1. Рассеяние внутри Γ-долины. При анализе рассеяния вблизи Γ-точки удобно использовать главные кристаллографические оси x_0, y_0, z_0, в этом подразделе индекс 0 у координат опускается. Поскольку электронные состояния на дне зоны проводимости германия в точке Γ образуют базис спинорного представления Γ_7^-, прямое произведение $\Gamma_7^- \times \Gamma_7^-$ содержит векторные представления A_1^+ и F_2^+, а матрица $\hat{I}$ и три матрицы σ_α также образуют базисы представлений A_1^+ и F_2^+, то коэффициенты $A_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ и $\mathbf{B}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ в (12) являются инвариантом и псевдовектором в группе O_h. Таким образом, из метода инвариантов следует, что в разложении этих коэффициентов по смещениям решетки и волновым векторам должны содержаться только инвариантные и псевдовекторные комбинации. Кроме того, должны соблюдаться ограничения (13), (18). Опуская промежуточные выкладки, приведем ответ для матричных элементов рассеяния на акустических фононах

$$A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \Xi(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}), \tag{19}$$

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \mathrm{i}\sum_{j=1}^{6} R_j \mathbf{S}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}^{(j)}, \tag{20}$$

где константа деформационного потенциала Ξ и коэффициенты R_j вещественны, а шесть псевдовекторов $\mathbf{S}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}^{(j)}$ имеют вид

$$\begin{aligned}
S_z^{(1)} &= (\mathbf{K} \times \mathbf{q})_z (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}),\\
S_z^{(2)} &= (\mathbf{K} \times \mathbf{q})_x u_{zx} + (\mathbf{K} \times \mathbf{q})_y u_{yz},\\
S_z^{(3)} &= (\mathbf{K} \times \mathbf{q})_z u_{zz},\\
S_z^{(4)} &= (K_x q_y + K_y q_x)(u_{xx} - u_{yy}),\\
S_z^{(5)} &= (K_y q_z + K_z q_y) u_{zx} - (K_z q_x + K_x q_z) u_{yz},\\
S_z^{(6)} &= (K_x q_x - K_y q_y) u_{xy}.
\end{aligned} \tag{21}$$

Компоненты тензора деформации, отвечающие акустическому фонону $\nu = \mathrm{LA}$, TA1, TA2, связаны

Таблица 3. Коэффициенты R_j $(j = 1\dots 6)$, входящие в формулу (20) и описывающие спин-зависимую часть матрицы рассеяния внутри долины Γ

R_j	Значение	
	$\mathrm{eV\cdot nm^2}$	$\mathrm{eV\cdot nm}$
R_1	-0.61	
R_2	0.55	4.35
R_3	0.60	
R_4	-0.83	
R_5	-1.19	0.0055
R_6	2.00	0.35

Примечание. В первом столбце перечислены коэффициенты, во втором приведены их значения для рассеяния на акустических фононах, в третьем — аналогичные значения для рассеяния на оптических фононах.

с векторной амплитудой (17) соотношением $u_{\alpha\beta} = \mathrm{i}\mathscr{A}(q_\alpha\xi_{\nu,\beta} + q_\beta\xi_{\nu,\alpha})$. Поскольку параметр $\Delta C = c_{12} + 2c_{44} - c_{12}$ в кристаллах Ge невелик [53], можно пренебречь анизотропией упругих волн и зависимостью скорости продольного или поперечного звука от ориентации волнового вектора $\mathbf{q}$. В этом случае векторы поляризации $\boldsymbol{\xi}$ принимают вид $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{LA}}(\mathbf{q}) = \mathbf{q}/q$, $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{TA1}}(\mathbf{q}) = (q_y, -q_x, 0)/\sqrt{q_x^2+q_y^2}$, $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{TA2}}(\mathbf{q}) = (q_xq_z, q_yq_z, -q_x^2-q_y^2)/(q\sqrt{q_x^2+q_y^2})$, где $q \equiv |\mathbf{q}| = \sqrt{q_x^2+q_y^2+q_z^2}$. Матрица рассеяния на оптических фононах получается из (19)–(21) подстановкой $u_{xx} = u_{yy} = u_{zz} = 0$, заменой компонент u_{yz}, u_{zx}, u_{xy} соответственно на компоненты $U_{\mathrm{OP},x}, U_{\mathrm{OP},y}$ и $U_{\mathrm{OP},z}$ вектора относительного колебания подрешеток и переобозначением констант.

Численный расчет при использовании метода псевдопотенциала дает для константы деформационного потенциала Ξ значение 8.42 eV, а значения коэффициентов R_j для акустических и оптических фононов указаны в табл. 3.

3.2.2. Рассеяние внутри L-долины. В отличие от упрощенного описания спин-зависимого рассеяния на фононах [16,19], представим полное выражение для зависимости матрицы рассеяния внутри L-долины от волновых векторов $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}$. Для рассеяния внутри долины L матрица рассеяния $\hat{M}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ должна быть инвариантна относительно точечной группы D_{3d} [3,30]. Мы рассматриваем точку $(\pi/a)(1,1,1)$ и выбираем систему координат, ориентированную относительно [111]. В этом случае коэффициенты $A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$, $B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}$ и пара коэффициентов $(B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};x}, B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};y}) \equiv \mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\perp}$ преобразуются по неприводимым представлениям A_1^+, A_2^+ и E^+ соответственно; сумма $u_{xx}+u_{yy}$, компонента u_{zz} или $U_z \propto \xi_{\mathrm{OP},z}$ являются инвариантами группы D_{3d}, а пары (u_{xz}, u_{yz}), $(-2u_{xy}, u_{xx}-u_{yy})$, $(\xi_{\mathrm{OP},x}, \xi_{\mathrm{OP},y})$ образуют базисы представления E^+. В связи с понижением симметрии матрица рассеяния в окрестности L-точки имеет более сложный вид

$$A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \Xi_\perp(u_{xx}+u_{yy}) + \Xi_\parallel u_{zz}, \tag{22}$$

$$B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z} = \mathrm{i}\sum_{j=1}^{8} C_j S^{(j)}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}, \quad \mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\perp} = \mathrm{i}\sum_{j=1}^{18} R_j \mathbf{S}^{(j)}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\perp}, \tag{23}$$

коэффициент $A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ в нулевом приближении характеризуется двумя константами деформационного потенциала $\Xi_\perp$ и $\Xi_\parallel$, а коэффициенты $B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}$ и $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\perp}$ — восемью и восемнадцатью константами. Приведем выражения для соответствующих билинейных комбинаций $S_z^{(j)}$ и $\mathbf{S}_\perp^{(j)}$

$$\begin{aligned}
&S_z^{(1)} = (u_{xx}+u_{yy})(\mathbf{K}\times\mathbf{q})_z, \quad S_z^{(2)} = u_{zz}(\mathbf{K}\times\mathbf{q})_z,\\
&S_z^{(3)} = 2u_{xy}(q_xK_x - q_yK_y) - (u_{xx}-u_{yy})(q_xK_y + q_yK_x),\\
&S_z^{(4)} = q_z[(u_{xx}-u_{yy})K_x - 2u_{xy}K_y],\\
&S_z^{(5)} = K_z[(u_{xx}-u_{yy})q_x - 2u_{xy}q_y],\\
&S_z^{(6)} = u_{yz}(K_xq_y + K_yq_x) - u_{xz}(K_xq_x - K_yq_y),\\
&S_z^{(7)} = q_z(u_{xz}K_y - u_{yz}K_x), \quad S_z^{(8)} = K_z(u_{xz}q_y - u_{yz}q_x),
\end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}
&\mathbf{S}_\perp^{(1)} = (u_{xx}+u_{yy})q_z(-K_y, K_x), \quad \mathbf{S}_\perp^{(2)} = u_{zz}q_z(-K_y, K_x),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(3)} = (u_{xx}+u_{yy})K_z(-q_y, q_x), \quad \mathbf{S}_\perp^{(4)} = u_{zz}K_z(-q_y, q_x),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(5)} = (u_{xx}+u_{yy})(q_xK_x - q_yK_y, -q_yK_x - q_xK_y),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(6)} = u_{zz}(q_xK_x - q_yK_y, -q_yK_x - q_xK_y),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(7)} = q_zK_z(u_{xx}-u_{yy}, -2u_{xy}),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(8)} = (q_xK_x + q_yK_y)(u_{xx}-u_{yy}, -2u_{xy}),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(9)} = q_zK_z(-u_{yz}, u_{xz}),\\
&S_\perp^{(10)} = (q_xK_x + q_yK_y)(-u_{yz}, u_{xz}),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(11)} = [(u_{xx}-u_{yy})(q_xK_x - q_yK_y) - 2u_{xy}(q_xK_y + q_yK_x),\\
&\qquad (u_{xx}-u_{yy})(q_xK_y + q_yK_x) + 2u_{xy}(q_xK_x - q_yK_y)],\\
&\mathbf{S}_\perp^{(12)} = [u_{xz}(q_xK_y + q_yK_x) - u_{yz}(q_xK_x - q_yK_y),\\
&\qquad - u_{xz}(q_xK_x - q_yK_y) - u_{yz}(q_xK_y + q_yK_x)],\\
&\mathbf{S}_\perp^{(13)} = K_z[(u_{xx}-u_{yy})q_y - 2u_{xy}q_x, (u_{xx}-u_{yy})q_x + 2u_{xy}q_y],\\
&\mathbf{S}_\perp^{(14)} = q_z[(u_{xx}-u_{yy})K_y - 2u_{xy}K_x, (u_{xx}-u_{yy})K_x + 2u_{xy}K_y],\\
&\mathbf{S}_\perp^{(15)} = K_z(u_{yz}q_y - u_{xz}q_x, u_{yz}q_x + u_{xz}q_y),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(16)} = q_z(u_{yz}K_y - u_{xz}K_x, u_{yz}K_x + u_{xz}K_y),\\
&S_\perp^{(17)} = (\mathbf{K}\times\mathbf{q})_z(2u_{xy}, u_{xx}-u_{yy}),\\
&\mathbf{S}_\perp^{(18)} = (\mathbf{K}\times\mathbf{q})_z(u_{xz}, u_{yz}).
\end{aligned} \tag{25}$$

Численный расчет с помощью метода псевдопотенциала дает значения $\Xi_\perp = -8.6$ eV и $\Xi_\parallel = 5.8$ eV для констант

Таблица 4. Коэффициенты C_j $(j = 1 \dots 8)$, входящие в формулу (23) и описывающие спин-зависимую часть $B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}\sigma_z$ матрицы рассеяния внутри L-долины

G_j	Значение	
	$\mathrm{eV} \cdot \mathrm{nm}^2$	$\mathrm{eV} \cdot \mathrm{nm}$
C_1	$-5.6 \cdot 10^{-2}$	$1.45 \cdot 10^{-1}$
C_2	$-4.8 \cdot 10^{-2}$	
C_3	$1.2 \cdot 10^{-1}$	
C_4	$6.0 \cdot 10^{-3}$	
C_5	$8.6 \cdot 10^{-3}$	
C_6	$-2.0 \cdot 10^{-2}$	$6.0 \cdot 10^{-2}$
C_7	$-6.0 \cdot 10^{-4}$	$-8.0 \cdot 10^{-3}$
C_8	$-2.6 \cdot 10^{-3}$	$1.62 \cdot 10^{-2}$

Примечание. В первом столбце перечислены коэффициенты, во втором приведены их значения для рассеяния на акустических фононах, в третьем — аналогичные значения для рассеяния на оптических фононах.

деформационного потенциала, значения коэффициентов C_j и R_j приведены в табл. 4 и 5. Коэффициенты $A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$, $B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}$, $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\perp}$ матрицы рассеяния на оптических фононах получаются формальной заменой $u_{xx} + u_{yy}$ на $\xi_{\mathrm{OP},z}$ и (u_{xz}, u_{yz}) на $\xi_{\mathrm{OP},x}, \xi_{\mathrm{OP},y}$, так что остаются один вклад в $A_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$, четыре вклада в $B_{\mathbf{k}',\mathbf{k};z}$ и семь вкладов в $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\perp}$. Метод псевдопотенциала дает для константы спин-независимого взаимодействия с оптическими фононами значение 43.8 eV/nm. Значения коэффициентов, определяющих спин-зависимое рассеяние на оптических фононах, приведены в третьем столбце табл. 4, а также в третьем и шестом столбцах табл. 5. По порядку величины коэффициенты согласуются с результатами, полученными ранее в работах [16,19].

3.3. Междолинное рассеяние

3.3.1. Рассеяние между долинами Г и L. Переходы между точками Г и L в германии осуществляются L-фононами, которые преобразуются по базисным функциям неприводимых представлений L_1, $L_{2'}$, L_3 и $L_{3'}$ [3]. Для $\Gamma{-}L$ рассеяния некоторые матричные элементы с сохранением и переворотом спина отличны от нуля уже в нулевом порядке по разностным волновым векторам

$$\delta\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}_\Gamma - (\mathbf{k} - \mathbf{k}_L), \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}_\Gamma + \mathbf{k} - \mathbf{k}_L,$$

где введены точки экстремумов $\mathbf{k}_\Gamma = (\pi/a)(0,0,0)$ и $\mathbf{k}_L = (\pi/a)(1,1,1)$. В первой части подраздела проанализированы вклады нулевого порядка с помощью техники подгруппы [35,36]. Затем для каждой фононной ветви использован метод инвариантов для нахождения вкладов первого порядка с учетом инвариантности электрон-фононного взаимодействия к операциям точечной группы D_{3d}. Для определенности рассматриваются переходы $L_6^+ \to \Gamma_7^-$, матричные элементы обратных переходов получаются эрмитовым сопряжением.

Нижняя зона проводимости в Г-точке образована базисными функциями неприводимого представления Γ_7^- [3],

$$\Gamma_{7(1)}^- = \Gamma_{2'} \uparrow, \quad \Gamma_{7(2)}^- = \Gamma_{2'} \downarrow, \tag{26}$$

где $\Gamma_{2'}$ — орбитальная блоховская функция указанной симметрии. В четырнадцати- и шестнадцатизонных моделях зонной структуры германия спинорное представление Γ_7^- встречается только один раз, поэтому в отличие от функций (11) в точке L в функциях (26) отсутствует спин-орбитальное смешивание. Из разложения прямого произведения $L_6^+ \times \Gamma_7^- = L_{1'} + L_{2'} + L_{3'}$ и типа фононов в L-точке следует, что в нулевом порядке переходы разрешены только для $L_{2'}$- и $L_{3'}$-фононов. Применяя к матричным элементам рассеяния $L_6^+ \to \Gamma_7^-$ операцию симметрии $\{C_{2x}|\boldsymbol{\tau}\}$ (поворот на 180° вокруг оси $[1\bar{1}0]$ и нетривиальная трансляция на вектор $\boldsymbol{\tau} = (a/4)(1,1,1)$), получаем дополнительные условия симметрии, накладываемые на отличные от нуля матричные элементы,

$$\langle \Gamma_{7(1)}^- | V_{L_{2'}} | L_{6(1)}^+ \rangle = \langle \Gamma_{7(2)}^- | V_{L_{2'}} | L_{6(2)}^+ \rangle, \tag{27}$$

$$\langle \Gamma_{7(1)}^- | V_{L_{3'(1)}} | L_{6(2)}^+ \rangle = -\langle \Gamma_{7(2)}^- | V_{L_{3'(2)}} | L_{6(1)}^+ \rangle. \tag{28}$$

Здесь $V_{L_{2'}}, V_{L_{3'(1)}}, V_{L_{3'(2)}}$ — операторы взаимодействия с L-фононами, индексы 1 и 2 различают фононные моды ветви $L_{3'}$, преобразующиеся как функции $x + \mathrm{i}y$ и $x - \mathrm{i}y$ соответственно (см. обозначения $L_{3'(1)}, L_{3'(2)}$ в табл.1). Введем амплитуды колебаний фононов $U_{L_{2'}}, U_{L_{3',x}}, U_{L_{3',y}}$. Тогда матрицу $\Gamma{-}L$ рассеяния можно представить в виде

$$||M_{\Gamma,L;s',s}|| = \begin{bmatrix} d_1 U_{L_{2'}} & d_2(U_{L_{3',x}} - \mathrm{i}U_{L_{3',y}}) \\ -d_2(U_{L_{3',x}} + \mathrm{i}U_{L_{3',y}}) & d_1 U_{L_{2'}} \end{bmatrix}. \tag{29}$$

Для матричных элементов рассеяния с сохранением и переворотом спина при ориентации спина по орту $\mathbf{n}$, задаваемому углами θ, ϕ, получаем

$$|M_{\Gamma,L;\uparrow,\uparrow}|^2 = d_1^2 \overline{|U_{L_{2'}}|^2} + d_2^2 \overline{|U_{L_{3',x}}|^2} \sin^2\theta$$

$$|M_{\Gamma,L;\downarrow,\uparrow}|^2 = d_2^2 \overline{|U_{L_{3',x}}|^2} \left(1 + \cos^2\theta\right), \tag{30}$$

где черта сверху означает усреднение квадрата фононной амплитуды по равновесному распределению фононов. Значения d_1 и d_2, найденные путем численного расчета в методе псевдопотенциала, равны 18.21 и 0.35 eV/nm соответственно.

Для построения вкладов в матрицу рассеяния, линейных по $\delta\mathbf{q}$ и $\mathbf{K}$, мы используем основной прием метода инвариантов. Для переходов из зоны орбитального состояния L_1 в зону, произошедшую из орбитального состояния $\Gamma_{2'}$, матрица $\hat{M}_{\Gamma,L}$ строится из линейных комбинаций произведений a) единичной матрицы $\hat{I}$ размерности 2×2 и спиновых матриц Паули σ_α; b) амплитуд колебаний решетки U_i в L-точке; c) степеней $\delta\mathbf{q}$, $\mathbf{K}$ так,

Таблица 5. Коэффициенты R_j $(j = 1 \dots 18)$ в формуле (23) для $\mathbf{B}_{\mathbf{k}',\mathbf{k};\perp}$, описывающей спин-зависимую часть матрицы рассеяния внутри L-долины

R_j	Значение		R_j	Значение	
	$\mathrm{eV} \cdot \mathrm{nm}^2$	$\mathrm{eV} \cdot \mathrm{nm}$		$\mathrm{eV} \cdot \mathrm{nm}^2$	$\mathrm{eV} \cdot \mathrm{nm}$
R_1	$-3.5 \cdot 10^{-3}$	$6.0 \cdot 10^{-3}$	R_{10}	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$-2.8 \cdot 10^{-2}$
R_2	$2.1 \cdot 10^{-3}$		R_{11}	$-6.0 \cdot 10^{-4}$	
R_3	$4.2 \cdot 10^{-3}$	$-2.0 \cdot 10^{-2}$	R_{12}	$-4.9 \cdot 10^{-3}$	$-6.5 \cdot 10^{-2}$
R_4	$0.5 \cdot 10^{-4}$		R_{13}	$3.3 \cdot 10^{-3}$	
R_5	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	R_{14}	$5.0 \cdot 10^{-3}$	
R_6	$3.5 \cdot 10^{-3}$		R_{15}	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{-2}$
R_7	$-1.0 \cdot 10^{-5}$		R_{16}	$8.6 \cdot 10^{-4}$	$-1.8 \cdot 10^{-2}$
R_8	$-1.2 \cdot 10^{-3}$		R_{17}	$-2.5 \cdot 10^{-3}$	
R_9	$-5.9 \cdot 10^{-4}$	$6.9 \cdot 10^{-3}$	R_{18}	$-2.0 \cdot 10^{-3}$	$-7.0 \cdot 10^{-2}$

Примечание. В первом и четвертом столбцах перечислены коэффициенты, во втором и пятом столбцах приведены их значения для рассеяния наакустических фононах, в третьем и шестом — аналогичные значения для рассеяния на оптических фононах.

чтобы эти комбинации преобразовывались по представлению A_2^- группы D_{3d} (поскольку функция $\Gamma_{2'}$ в группе D_{3d} отвечает представлению A_2^-). При этом нужно учесть, что матрица $\hat{I}$ образует базис представления A_1^+; матрицы σ_x, σ_y преобразуются по представлению E^+; матрицы σ_z — по представлению A_2^+; δq_z или K_z — по представлению A_2^-; пара $\delta q_x, \delta q_y$ или K_x, K_y — по представлению E^-, а амплитуды колебаний решетки U_{L_1}, $U_{L_{2'}}$, $(U_{L_3,x}, U_{L_3,y})$ и $(U_{L_{3'},x}, U_{L_{3'},y})$ соответствуют представлениям A_1^+, A_2^-, E^+ и E^-. Пользуясь таким рецептом, мы можем записать матрицу (29) в виде $d_1 U_{L_{2'}} I - \mathrm{i} d_2 (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{U}_{L_{3'}})_z$. Переходя теперь к линейным по волновому вектору вкладам, для краткости выпишем линейные члены по $\mathbf{K}$; аналогичные члены, линейные по $\delta\mathbf{q}$, получаются заменой компонент $K_\alpha \to \delta q_\alpha$ и переобозначением коэффициентов $T_j \to T_j'$. Ясно, что коэффициенты разложения отдельно по $\mathbf{k}' - \mathbf{k}_\Gamma$ и $\mathbf{k} - \mathbf{k}_L$ равны соответственно сумме $T_j' + T_j$ и разности $T_j' - T_j$.

Для рассеяния на фононе L_1 имеем

$$\hat{M}_{\Gamma,L}(L_1) = \left[\mathrm{i} T_{A1} K_z + T_{B1} (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{K}_\perp)_z\right] U_{L_1}, \tag{31}$$

где матрица $\hat{I}$ опущена. Рассеяние на фононе L_3 описывается четырьмя параметрами

$$\hat{M}_{\Gamma,L}(L_3) = \mathrm{i} T_{A2} (\mathbf{U}_{L_3} \times \mathbf{K})_z + T_{B2} (K_x U_{L_3x} + K_y U_{L_3y}) \sigma_z + T_{B3} K_z (U_{L_{3x}} \sigma_x + U_{L_{3y}} \sigma_y) + T_{B4} \times \left[(K_x U_{L_{3y}} + K_y U_{L_{3x}}) \sigma_x + (K_x U_{L_{3x}} - K_y U_{L_{3y}}) \sigma_y\right]. \tag{32}$$

Здесь коэффициенты T_j вещественны, фазовый множитель i учитывает второе из тождеств (13а). Значения коэффициентов приведены в табл. 6.

Процессы рассеяния, спин-независимые с участием фонона $L_{3'}$ и спин-зависимые с участием фонона $L_{2'}$, разрешаются во втором порядке по $\delta\mathbf{q}, \mathbf{K}$ и здесь не рассматриваются.

3.3.2. Рассеяние между долинами L. Покажем теперь, как используется метод инвариантов для описания рассеяния электронов между двумя долинами L на X-фононах, которые в решетке алмаза преобразуются по проективным представлениям X_3, X_1 и X_4. При этом будут не только подтверждены правила отбора [16,19] для вкладов нулевого порядка по разностным волновым векторам $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_L$, но и построены вклады первого порядка в спин-зависимую матрицу рассеяния. Для определенности рассматриваются переходы между долинами L с $\mathbf{k}_L = (\pi/a)(1, 1, 1)$ и L_t с $\mathbf{k}_{L_t} = (\pi/a)(1, 1, -1)$. Фактор-группы групп волновых векторов $\mathbf{k}_L$ и $\mathbf{k}_{L_t}$ имеют четыре общих элемента $g_1 = \{e|0\}$, $g_2 = \{C_{2x}|\boldsymbol{\tau}\}$, $g_3 = \{i|\boldsymbol{\tau}\}$, $g_4 = \{\sigma|0\}$ (группа C_{2h}), где e — единичный элемент, $\boldsymbol{\tau} = (a/4)(1, 1, 1)$ — вектор нетривиальной трансляции, i — пространственная инверсия, σ — отражение в плоскости $(1\bar{1}0)$. Следуя [54], обозначим неприводимые представления этой группы в виде A_1, A_2, A_3 и A_4. Удобно ввести систему координат $x_1 \parallel [110], y_1 \parallel [\bar{1}10], z_1 \parallel [001]$, связанную с главными кристаллографическими осями

Таблица 6. Коэффициенты в линейных по разностным волновым векторам вкладах (31), (32) в матрицу электрон-фононного рассеяния между долинами Γ и L (значения коэффициентов приводятся в eV)

Коэффициент	Значение	Коэффициент	Значение
T_{A1}	-20.5	T_{B2}	-0.34
T'_{A1}	30.5	T'_{B2}	0.73
T_{A2}	9.15	T_{B3}	$-38.23 \cdot 10^{-2}$
T'_{A2}	-12.0	T'_{B3}	$37.64 \cdot 10^{-2}$
T_{B1}	-2.06	T_{B4}	$-2.46 \cdot 10^{-2}$
T'_{B1}	1.66	T'_{B4}	$2.15 \cdot 10^{-2}$

Таблица 7. Коэффициенты матрицы электрон-фононного рассеяния для переходов между L-долинами

Параметр	Значение, eV	Параметр	Значение, eV/nm	Параметр	Значение, eV/nm
R_0	6.49	d_0	6.56	d_2^{E}	-0.10
R_1	$-3.65 \cdot 10^{-2}$	d_{y_1}	0.18	d_2^{Y}	0.45
R_2	$-1.43 \cdot 10^{-1}$	d_{z_1}	0.66	$d_{y_1}^{\mathrm{E}}$	-0.08
R_3	$4.58 \cdot 10^{-2}$			$d_{y_1}^{\mathrm{Y}}$	0.26
R_4	$-5.17 \cdot 10^{-2}$			$d_{z_1}^{\mathrm{E}}$	0.25
R_5	$8.68 \cdot 10^{-2}$			$d_{z_1}^{\mathrm{Y}}$	0.41

Примечание. В первых двух столбцах приведены параметры R_i, входящие во вклад (39) первого порядка, третий и четвертый столбцы дают коэффициенты вклада нулевого порядка в матрицу рассеяния (38). В пятом и шестом столбцах приведены коэффициенты, входящие в формулы (29) и (35) и описывающие спин-зависимое междолинное рассеяние электрона на фононах по отдельности в механизмах Эллиота (индекс E) и Яфета (индекс Y); суммы этих коэффициентов для обоих механизмов переходят в значение 0.35 eV/nm для $\Gamma{-}L$ рассеяния и значения, представленные в четвертом столбце.

соотношениями

$$x_1 = \frac{x_0 + y_0}{\sqrt{2}}, \quad y_1 = \frac{-x_0 + y_0}{\sqrt{2}}, \quad z_1 = z_0. \tag{33}$$

Координаты x_1, z_1 преобразуются по представлению A_3, координата y_1 — по представлению A_4, матрицы Паули $\sigma_{x_1}, \sigma_{z_1}$ — по представлению A_2, матрица σ_{y_1} есть инвариант группы C_{2h}; для фононных мод имеем разложения

$$X_1|_{C_{2h}} = A_1 + A_3, \quad X_2|_{C_{2h}} = A_2 + A_4,$$
$$X_3|_{C_{2h}} = A_2 + A_3, \quad X_4|_{C_{2h}} = A_1 + A_4. \tag{34}$$

Блоховские функции в точках $\mathbf{k}_L$ и $\mathbf{k}_{L_t}$ связаны поворотом C_{2z} на 180° вокруг оси z_0, так как $\mathbf{k}_{L_t} = -C_{2z}\mathbf{k}_L$ и точки $\mathbf{k}_L$ и $-\mathbf{k}_L$ эквивалентны. Произведение функций $\psi^*_{L_1^t}\psi_{L_1}$ преобразуется по представлению A_3. Следовательно, матрица рассеяния $\hat{M}_{L_tL}(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa})$, составленная из произведений матриц 2×2, амплитуд колебаний решетки U_j и разностных волновых векторов $\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}$, должна преобразовываться по представлению A_3. Разложим эту матрицу по матрицам Паули (см. (13))

$$\hat{M}_{L_tL}(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}) = A(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}). \tag{35}$$

Коэффициенты A и B_{y_1} должны преобразовываться по представлению A_3, а коэффициенты B_{x_1} и B_{z_1} — по представлению A_4. Дополнительные ограничения на матричные элементы накладывают симметрия кристалла к преобразованию C_{2z} и инверсии времени. Опуская детали, приведем эти условия для коэффициентов в (35) при рассеянии на фононе ν

$$A(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}; \nu) = \eta_\nu A(-C_{2z}\boldsymbol{\kappa}, -C_{2z}\boldsymbol{\kappa}'; \nu),$$
$$B_{z_1}(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}; \nu) = -\eta_\nu B_{z_1}(-C_{2z}\boldsymbol{\kappa}, -C_{2z}\boldsymbol{\kappa}'; \nu),$$
$$B_\alpha(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}; \nu) = \eta_\nu B_\alpha(-C_{2z}\boldsymbol{\kappa}, -C_{2z}\boldsymbol{\kappa}'; \nu), \quad \alpha = x_1, y_1, \tag{36}$$
$$A(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}; \nu)^* = A(-\boldsymbol{\kappa}', -\boldsymbol{\kappa}; \nu),$$
$$B_\alpha(\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa}; \nu)^* = -B_\alpha(-\boldsymbol{\kappa}', -\boldsymbol{\kappa}; \nu), \quad \alpha = x_1, y_1, z_1, \tag{37}$$

где η_ν — четность фононной моды по отношению к преобразованию C_{2z}. Учтем далее, что для X_1-, X_2-фононов $\eta = 1$, а для X_3-, X_4-фононов $\eta = -1$. Поскольку фононы X_2 в германии отсутствуют, в дальнейшем они нами обсуждаться не будут.

Начнем анализ с нулевого приближения, полагая $\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa} = 0$. Из (36) получаем, что спин-независимое $L_t{-}L$ рассеяние, описываемое коэффициентом A, разрешено для фонона X_1, коэффициент B_{y_1} также отличен от нуля только для фонона X_1, коэффициент B_{z_1} отличен от нуля для фонона X_4, а коэффициент $B_{x_1} = 0$ в этом приближении. Таким образом, матрица (35) при $\boldsymbol{\kappa}', \boldsymbol{\kappa} = 0$ имеет вид

$$\hat{M}_{L_tL}(0,0) = d_0 U_{A_3(X_1)} + \mathrm{i}(d_{y_1} U_{A_3(X_1)}\sigma_{y_1} + d_{z_1} U_{A_4(X_4)}\sigma_{z_1}), \tag{38}$$

где $U_{A_i(X_j)}$ — амплитуда колебаний X_j-фонона поляризации A_i. Используя формулы (33), легко переписать это выражение в системе координат x_0, y_0, z_0.

Аналогично находится линейный вклад в матрицу рассеяния. Этот вклад для рассеяния на X_3-фононе может быть существенным при низких температурах из-за относительно небольшой энергии таких фононов [19]. Опуская промежуточные выкладки, приведем окончательный результат, записанный в главных кристаллографических осях (индекс 0 для краткости опустим),

$$A(X_3) = \mathrm{i}R_0(\delta q_x - \delta q_y)U_{A_2(X_3)},$$
$$B_z(X_3) = [R_1(K_x + K_y) + R_2\delta q_z]U_{A_2(X_3)},$$
$$B_x(X_3) = [R_3(\delta q_x + \delta q_y) + R_4(\delta q_x - \delta q_y) + R_5 K_z]U_{A_2(X_3)},$$
$$B_y(X_3) = [R_3(\delta q_x + \delta q_y) - R_4(\delta q_x - \delta q_y) + R_5 K_z]U_{A_2(X_3)}. \tag{39}$$

Значения фигурирующих здесь коэффициентов приведены в табл. 7. Видно, что, как и для других механизмов рассеяния, процессы с сохранением спина идут намного интенсивнее процессов с переворотом спина.

3.4. Механизмы Эллиота и Яфета

В этом подразделе анализируются механизмы Эллиота [40] и Яфета [34] для электрон-фононного рассеяния с переворотом спина. В общем случае оператор электрон-фононного взаимодействия имеет вид [33,34,40]

$$H_{\mathrm{ep}} = V^{\mathrm{E}} + V^{\mathrm{Y}} = \sum_{\mathbf{q},\nu} \mathbf{u}_{\mathbf{q},\nu} \cdot \boldsymbol{\nabla} \left[V_0(\mathbf{r})\hat{I} + \frac{\hbar}{4m_e^2c^2} (\boldsymbol{\nabla} V_0(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]. \tag{40}$$

Здесь $\mathbf{u}_{\mathbf{q},\nu}$ — вектор смещения для фонона ν с волновым вектором $\mathbf{q}$, другие обозначения определены в разделе 2 (см. (1)). Отдельные вклады в рассеяние с переворотом спина от первого, спин-независимого, оператора V^{E} и второго, спин-зависимого, оператора V^{Y} соответствуют механизмам Эллиота и Яфета. Симметрийные свойства этих вкладов в матрицу рассеяния неразличимы, но это независимые вклады, и их сравнительный анализ представляет интерес. Для иллюстрации проведем такой анализ для матричных элементов междолинного рассеяния с переворотом спина, рассчитанных в нулевом порядке по разностным волновым векторам.

Для рассеяния между долинами Γ и L матричные элементы для механизмов Эллиота и Яфета могут быть по отдельности представлены в виде

$$M^{\mathrm{E}}_{\Gamma L;\uparrow\downarrow}(L_{3'}) = \frac{c}{A} \left\langle \Gamma_2^- \left| V^{\mathrm{E}}_{L_{3'(1)}} \right| L_{3y} + \mathrm{i}L_{3x} \right\rangle,$$

$$M^{\mathrm{Y}}_{\Gamma L;\uparrow\downarrow}(L_{3'}) = \frac{1}{A} \Big[\left\langle \Gamma_2^- \uparrow \left| V^{\mathrm{Y}}_{L_{3'(1)}} \right| L_1 \downarrow \right\rangle + c \left\langle \Gamma_2^- \uparrow \left| V^{\mathrm{Y}}_{L_{3'(1)}} \right| (L_{3y} + \mathrm{i}L_{3x}) \uparrow \right\rangle \Big]. \tag{41}$$

Очевидно, спин-орбитальное подмешивание состояний L_3 в зоне L_1 в точке L критично для вклада Эллиота.

Для междолинного рассеяния $(\pi/a)(1,1,1) \to \to (\pi/a)(1,1,-1)$ базисные функции L_6 выбраны так, чтобы в разложении их по $L_6(L_1)$ и $L_6(L_3)$ функция L_1 была умножена на спиновые столбцы $\uparrow_{z_0}$ или $\downarrow_{z_0}$, описывающие состояния спина с проекцией $\pm 1/2$ на направление [001] в системе осей x_0, y_0, z_0. Учитывая, что система координат x, y, z получается из системы x_0, y_0, z_0 тремя поворотами с углами Эйлера $\phi = \pi/4$, $\theta = \arccos(1/\sqrt{3})$, $\psi = 3\pi/2$, получаем выражения для указанных базисных функций

$$L_{6,1/2} = \uparrow_{z_0} L_1 - \uparrow_{z_0} \mathrm{i}\, c \sin\theta L_{3y} + \downarrow_{z_0} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} c (L_{3x} + \mathrm{i}\cos\theta L_{3y}),$$

$$L_{6,-1/2} = \downarrow_{z_0} L_1 + \downarrow_{z_0} \mathrm{i}\, c \sin\theta L_{3y} - \uparrow_{z_0} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} c (L_{3x} - \mathrm{i}\cos\theta L_{3y}), \tag{42}$$

где $c \approx 0.03$ — коэффициент спин-орбитального смешивания (см. (11)). Аналогичные функции в долине L_t связаны с функциями (42) соотношениями $L^t_{6s}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\pi/2} C_{2z} L_{6s}(\mathbf{r})$. Поскольку коэффициент спин-орбитального смешивания c в (11) мал, будем учитывать его в наименьшем неисчезающем приближении, при этом нормировочный множитель A^{-1} можно положить равным единице. Для спин-независимого рассеяния и для механизма Эллиота получаем

$$d_0 U_{A_3(X_1)} = \langle L_1^t | V^{\mathrm{E}}_{A_3(X_1)} | L_1 \rangle,$$

$$d^{\mathrm{E}}_{y_1} U_{A_3(X_1)} = -\frac{2}{\sqrt{3}}\, c \langle L_1^t | V^{\mathrm{E}}_{A_3(X_1)} | L_{3x} \rangle,$$

$$d^{\mathrm{E}}_{z_1} U_{A_4(X_4)} = -\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\, c \langle L_1^t | V^{\mathrm{E}}_{A_4(X_4)} | L_{3y} \rangle. \tag{43}$$

Для нахождения вклада Яфета нужно рассчитать матричный элемент от второго слагаемого в (40). Приведем окончательные формулы

$$\mathrm{i} d^{\mathrm{Y}}_{y_1} U_{A_3(X_1)} = \frac{\hbar}{4m_e^2c^2} \left\langle L_1^t \left| \frac{\partial}{\partial z_1} (\boldsymbol{\nabla} V_0 \times \hat{\mathbf{p}})_{y_1} \right| L_1 \right\rangle \times u_{\mathbf{q},z_1}[A_3(X_1)],$$

$$\mathrm{i} d^{\mathrm{Y}}_{z_1} U_{A_4(X_4)} = \frac{\hbar}{4m_e^2c^2} \left\langle L_1^t \left| \frac{\partial}{\partial y_1} (\boldsymbol{\nabla} V_0 \times \hat{\mathbf{p}})_{z_1} \right| L_1 \right\rangle \times u_{\mathbf{q},y_1}[A_4(X_4)]. \tag{44}$$

Результаты расчета методом псевдопотенциала приведены в шестом столбце табл. 7. Видно, что вклады от процессов Эллиота и Яфета имеют один и тот же порядок, хотя и могут различаться в несколько раз.

4. Заключение

Таким образом, в настоящей работе впервые построен для германия релятивистский шестнадцатизонный $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$-гамильтониан для описания дисперсии и спиновых свойств электронов в трех нижних зонах проводимости и двух верхних валентных зонах в долине L. Изучено внутри- и междолинное рассеяние электронов на фононах для долин L и Γ. С помощью метода инвариантов получены правила отбора и аналитические выражения для матриц рассеяния внутри долин L и Γ, а также $\Gamma-L$ и $L-L$ рассеяния. Микроскопический расчет матриц рассеяния в рамках метода псевдопотенциала позволил найти коэффициенты в выражениях для этих матриц и подтвердить правила отбора и зависимость их от волнового вектора. Парциальные вклады механизмов Эллиота и Яфета в спин-зависимое рассеяние сопоставимы по порядку величины, хотя и могут в отдельных случаях заметно различаться.

Приложение. Базисные функции в $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$-методе

В табл. 1 перечислены все 16 блоховских состояний (первый столбец), использованных нами при построении $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$-гамильтониана в точке L. Состояния обозначаются в виде $|v, j\rangle$ $(j = 1, 2, 3, 4)$ или $|c, j\rangle$ $(j = 1 \dots 12)$ соответственно в валентной зоне (v) и зоне проводимости (c). Одновременно для каждого состояния в том же столбце указывается соответствующее ему неприводимое спинорное представление с дополнительным индексом 1, 2 (в скобках после индекса 6) для двумерных представлений L_6^+ или L_6^-, а также векторное представление, из которого оно произошло. Например, символ $L_{6(2)}^-(L_{3'}^v)$ означает вторую базисную функцию представления L_6^-, которое происходит из представления $L_{3'}$ в валентной зоне.

Чтобы однозначно определить матрицы преобразований для представленных блоховских функций, во втором столбце таблицы приводим простейшие примеры базисных функций, преобразующихся по неприводимым представлениям двойной группы D_{3d}. При построении этих базисных функций мы фиксировали одну из плоскостей отражения σ_v так, чтобы она содержала оси y и z. Вертикальные стрелки $\uparrow, \downarrow$ обозначают состояния со спином вверх и вниз относительно направления орта $\hat{z}$. Для каждого из представлений L_4^+, L_5^+, L_6^+ даются два различных примера базисных функций, чтобы функции одного набора зависели от z, а функции другого набора от z не зависели. Это облегчает нахождение всех линейно независимых междузонных матричных элементов оператора импульса. Обозначения диагональных энергий $H_{0,jj}$ показаны в третьем столбце. Поскольку состояния L_4^+ и L_5^+ (или L_4^- и L_5^-) связаны между собой операцией инверсии времени и их энергии совпадают, энергия таких состояний содержит двойной индекс 45. Индексами c и c' отмечаются энергии состояний в зоне проводимости, произошедших из разных векторных представлений, но совпадающих по симметрии: L_6^+ или L_6^-.

Список литературы

[1] I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma. Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
[1] M.W. Wu, J.H. Jiang, M.Q. Weng. Phys. Rep. **493**, 61 (2010).
[3] P.Y. Yu, M. Cardona. Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties. 3rd ed. Springer, N.Y. (2001).
[4] D. Culcer, L. Cywiński, Q. Li, X. Hu, S. Das Sarma. Phys. Rev. B **80**, 205 302 (2009).
[5] N.W. Gray, A. Tiwari. Appl. Phys. Lett. **98**, 102 112 (2011).
[6] K.R. Jeon, B.C. Min, I.J. Shin, C.Y. Park, H.S. Lee, Y.H. Jo, S.C. Shin. Appl. Phys. Lett. **98**, 262 102 (2011).
[7] B.T. Jonker, G. Kioseoglou, A.T. Hanbicki, C.H. Li, P.E. Thompson. Nature Phys. **3**, 542 (2007).
[8] I. Appelbaum, B. Huang, D. J. Monsma. Nature **447**, 295 (2007).
[9] L. Grenet, M. Jamet, P. Noé, V. Calvo, J.M. Hartmann, L.E. Nistor, B. Rodmacq, S. Auffret, P. Warin, Y. Samson. Appl. Phys. Lett. **94**, 032 502 (2009).
[10] S.P. Dash, S. Sharma, R.S. Patel, M.P. de Jong, R. Jansen. Nature **462**, 491 (2009).
[11] E.J. Loren, B.A. Ruzicka, L.K. Werake, H. Zhao, H.M. van Driel, A.L. Smirl. Appl. Phys. Lett. **95**, 092 107 (2009).
[12] J. Rioux, J.E. Sipe, Phys. Rev. B **81**, 155 215 (2010).
[13] E.J. Loren, J. Rioux, C. Lange, J.E. Sipe, H.M. van Driel, A.L. Smirl. Phys. Rev. B **84**, 214 307 (2011).
[14] P. Li, H. Dery. Phys. Rev. Lett. **107**, 107 203 (2011).
[15] A. Jain, L. Louahadj, J. Peiro, J.C. Le Breton, C. Vergnaud, A. Barski, C. Beigné, L. Notin, A. Marty, V. Baltz, S. Auffret, E. Augendre, H. Jaffrés, J.M. George, M. Jamet. Appl. Phys. Lett. **99**, 162 102 (2011).
[16] J.M. Tang, B.T. Collins, M.E. Flatté. Phys. Rev. B **85**, 045 202 (2012).
[17] F. Pezzoli, F. Bottegoni, D. Trivedi, F. Ciccacci, A. Giorgioni, P. Li, S. Cecchi, E. Grilli, Y. Song, M. Guzzi, H. Dery, G. Isella. Phys. Rev. Lett. **108**, 156 603 (2012).
[18] A. Jain, C. Vergnaud, J. Peiro, J.C. Le Breton, E. Prestat, L. Louahadj, C. Portemont, C. Ducruet, V. Baltz, A. Marty, A. Barski, P. Bayle-Guillemaud, L. Vila, J.-P. Attané, E. Augendre, H. Jaffrè s, J.-M. George, M. Jamet. Appl. Phys. Lett. **101**, 022 402 (2012).
[19] P. Li, Y. Song, H. Dery. Phys. Rev. B **86**, 085 202 (2012).
[20] P. Li, D. Trivedi, H. Dery. Phys. Rev. B **87**, 115203 (2013).
[21] Y. Zhou, W. Han, L.T. Chang, F. Xiu, M. Wang, M. Oehme, I.A. Fischer, J. Schulze, R.K. Kawakami, K.L. Wang. Phys. Rev. B **84**, 125 323 (2011).
[22] C. Tahan, M. Friesen, R. Joynt. Phys. Rev. B **66**, 035 314 (2002).
[23] M.S. Sherwin, A. Imamoglu, T. Montroy. Phys. Rev. A **60**, 3508 (1999).
[24] A.R. Calderbank, P. W. Shor. Phys. Rev. A **54**, 1098 (1996).
[25] C.H. Bennett, D.P. DiVincenzo, J.A. Smolin, W.K. Wootters. Phys. Rev. A **54**, 3824 (1996).
[26] D.G. Cory, M.D. Price, W. Maas, E. Knill, R. Laflamme, W.H. Zurek, T.F. Havel, S.S. Somaroo, Phys. Rev. Lett. **81**, 2152 (1998).
[27] A.R. Cameron, P. Riblet, A. Miller, Phys. Rev. Lett. **76**, 4793 (1996).
[28] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, F. Bassani. Phys. Rev. B **57**, 6493 (1998).
[29] Y.H. Kuo, Y.K. Lee, Y. Ge, S. Ren, J.E. Roth, T.I. Kamins, D.A.B. Miller, J.S. Harris. Nature **437**, 1334 (2005).
[30] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio. Group theory: application to the physics of condensed matter. Springer, Berlin (2008).
[31] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972) 584 с.
[32] L.C.L.Y. Voon, M. Willatzen. The $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$-method: electronic properties of semiconductors. Springer, Berlin (2009).
[33] Y. Song, H. Dery. Phys. Rev. B **86**, 085 201 (2012).
[34] Y. Yafet. In: Solid state physics / Eds F. Seitz, D. Turnbull. Academic, N.Y. (1963). V. 14. P. 1.
[35] M. Lax, J.J. Hopfield. Phys. Rev. **124**, 115 (1961).
[36] M. Lax. Phys. Rev. **138**, A793 (1965).
[37] Дж. Бирман. Пространственная симметрия и оптические свойства твердых тел. Т. I. Мир, М. (1978). 387 с.
[38] E. McCann, V.I. Fal'ko. Phys. Rev. Lett. **108**, 166 606 (2012).
[39] H. Ochoa, A.H.C. Neto, V.I. Fal'ko, F. Guinea. arXiv:1209.4382.
[40] R.J. Elliott. Phys. Rev. **96**, 266 (1954).
[41] S. Ridene, K. Boujdaria, H. Bouchriha, G. Fishman. Phys. Rev. B **64**, 085 329 (2001).

[42] R. Winkler. Spin-obit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems. Springer, Berlin (2003).
[43] В.Д. Дымников. ФТТ **43**, 1957 (2001).
[44] J. Rioux, J.E. Sipe. Physica E **45**, 1 (2012).
[45] P. Zhang, J. Zhou, M.W. Wu. Phys. Rev. B **77**, 235 323 (2008).
[46] Е.Л. Ивченко, Ю.Б. Лянда-Геллер, Г.Е. Пикус. ЖЭТФ **98**, 989 (1990).
[47] D.K. Ferry. Phys. Rev. B **14**, 1605 (1976).
[48] J.L. Cheng, M.W. Wu, J. Fabian. Phys. Rev. Lett. **104**, 016 601 (2010).
[49] P. Li, H. Dery. Phys. Rev. Lett. **105**, 037 204 (2010).
[50] J.L. Cheng, J. Rioux, J. Fabian, J.E. Sipe. Phys. Rev. B **83**, 165 211 (2011).
[51] M.M. Rieger, P. Vogl. Phys. Rev. B **48**, 14 276 (1993).
[52] W. Weber. Phys. Rev. B **15**, 4789 (1977).
[53] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ФТТ **49**, 422 (2007).
[54] R.J. Elliott, R. Loudon. J. Phys. Chem. Solids **15**, 146 (1960).