

Эффективные массы и g -факторы электронов в возбужденных состояниях в полупроводниках $A^{III}B^V$ в Γ -точке

© В.Д. Дымников, О.В. Константинов

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

E-mail: Dymnik@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 8 июля 2008 г.)

Впервые в научной литературе получены численные оценки эффективных масс и g -факторов в возбужденных зонах проводимости в полупроводниках $A^{III}B^V$ в Γ -точке. Вычисления проведены с помощью нового, развитого авторами в предыдущих работах подхода, основанного на правилах сумм.

PACS: 71.20.Nr, 71.18.+y

1. Введение

В работах [1–3] авторов настоящей публикации впервые был предложен и разработан новый подход к изучению спектра носителей тока в полупроводниках $A^{III}B^V$ в Γ -точке. Суть этого метода заключается в том, что, опираясь на строгие правила сумм для приведенных оптических матричных элементов, выведенных в [1,2], оказалось возможным связать межзонные оптические матричные элементы с экспериментально наблюдаемыми величинами (эффективными массами и g -факторами) и на основании эксперимента получить количественные оценки некоторых важных оптических матричных элементов и установить пространственную симметрию ближайших по энергии возбужденных зон в Γ -точке. В работе [3] принятая многозонная модель в Γ -точке в $A^{III}B^V$ [4] была с помощью правил сумм подтверждена экспериментальными данными. В [5] эта модель была обобщена на случай спин-орбитального смешивания, что позволило по-новому подойти к рассмотрению оптических переходов $\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_8$ внутри валентной зоны, ранее считавшихся запрещенными [6], и выразить матричный элемент этого перехода через экспериментально наблюдаемый параметр Латинжера q .

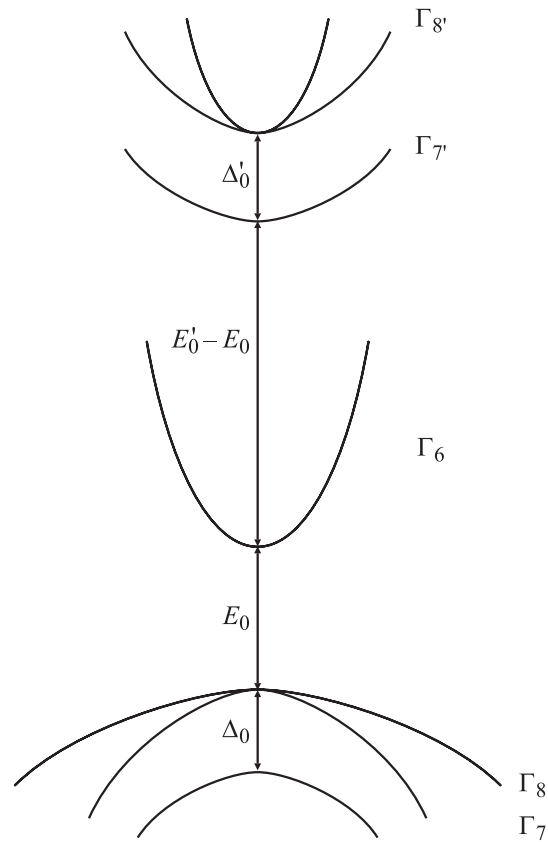
В настоящей работе в рамках обобщенной пятизонной модели, разработанной в [5], на основании нового подхода впервые количественно оцениваются эффективные массы и g -факторы носителей тока в полупроводниках $A^{III}B^V$ в зонах проводимости $\Gamma_{7'}$ и $\Gamma_{8'}$, расположенных по энергии выше зоны проводимости Γ_6 и соседних с нею. До сих пор какая-либо информация о характеристиках электронов в возбужденных состояниях $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{8'}$ в литературе отсутствовала.

2. Модель пяти зон

Дальнейшее наше исследование проводится в рамках обобщенной модели пяти зон, изображенной на рисунке. На рисунке зоны Γ_7 и Γ_8 составляют валентную зону, зона Γ_8 при удалении от Γ -точки расщепляется на подзоны легких и тяжелых дырок. Зона Γ_6 -зона проводимости,

зоны $\Gamma_{7'}$ и $\Gamma_{8'}$ — возбужденные зоны проводимости, и зона $\Gamma_{8'}$ при удалении от центра зоны Бриллюэна расщепляется на зоны легких и тяжелых возбуждений электронов. Величины E_{Γ_7} , E_{Γ_8} , E_{Γ_6} , $E_{\Gamma_{7'}}$, $E_{\Gamma_{8'}}$ — энергии состояний в Γ -точке. $E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8} = E_0$ — ширина запрещенной зоны, $\Delta_0 = E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7}$, $\Delta'_0 = E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_{7'}}$, Δ_0 , Δ'_0 — величины спин-орбитального расщепления, $E'_0 = E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}$.

Волновые функции в зонах Γ_7 , Γ_8 , $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{8'}$ относятся к функциям p -типа, и их вид с учетом спин-орбитального смешивания приведен в [5]. Состояния Γ_7 , $\Gamma_{7'}$ двукратно вырождены, а состояния Γ_8 , $\Gamma_{8'}$ четырехкратно вырождены. Предполагается, что двукратно вырожденные



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

состояния в зоне Γ_6 описываются волновыми функциями, составленными из координатных функций s -типа. В явном виде эти функции приведены в [1]. В зонной схеме на рисунке не учитывается линейное вырождение по квазиимпульсу \mathbf{p} в зонах $\Gamma_8, \Gamma_{8'}$.

3. Энергетический спектр электронов в зоне $\Gamma_{8'}$

Согласно модели Латинжера [7], электроны в полупроводниках $A^{III}B^V$ в зонах, относящихся к представлению Γ_8 , вблизи Γ -точки описываются гамильтонианом

$$H = -\frac{p^2}{2m} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) + \frac{\gamma_2}{m} (p_x^2 J_x^2 + p_y^2 J_y^2 + p_z^2 J_z^2) + \frac{\gamma_3}{m} [p_x p_y \{J_x, J_y\} + p_y p_z \{J_y, J_z\} + p_z p_x \{J_z, J_x\}].$$

Здесь m — масса электрона, \mathbf{p} — квазиимпульс, J_x, J_y, J_z — матрицы 4×4 момента $J = \frac{3}{2}$, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — параметры Латинжера. В гамильтониане не учитываются члены, линейные по \mathbf{p} . Собственные значения гамильтониана \mathbf{H} двукратно вырождены и записываются следующим образом:

$$\varepsilon^{(1)} = \varepsilon^{(2)} = -\frac{p^2}{2m} (\gamma_1 + 2|\gamma_2|g), \quad (1)$$

$$\varepsilon^{(3)} = \varepsilon^{(4)} = -\frac{p^2}{2m} (\gamma_1 - 2|\gamma_2|g), \quad (2)$$

где

$$g = \sqrt{1 + 3\gamma(v_x^2 v_y^2 + v_y^2 v_z^2 + v_z^2 v_x^2)},$$

$$\gamma = \frac{\gamma_3^2 - \gamma_2^2}{\gamma_2^2}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{p}/p. \quad (3)$$

В валентной зоне Γ_8 энергия $\varepsilon^{(1)}$ относится к электронам в подзоне легких дырок, $\varepsilon^{(3)}$ — к электронам в подзоне тяжелых дырок. В дальнейшем будут рассматриваться две зоны представления Γ_8 : зона проводимости Γ_8 и валентная зона Γ_8 . В зоне $\Gamma_{8'}$ параметры Латинжера будут записываться как $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3, \kappa', q'$, а в зоне Γ_8 — теми же значками, но без штриха.

В соответствии с результатами работы [2] параметры Латинжера в зоне проводимости $\Gamma_{8'}$ могут быть выражены следующим образом через суммы, содержащие приведенные матричные элементы:

$$\gamma'_1 = -1 - \frac{2}{3} A_{\Gamma_{8'}} - \frac{2}{3} C_{\Gamma_{8'}} - \frac{2}{3} D_{\Gamma_{8'}}^{(1)} - \frac{2}{3} D_{\Gamma_{8'}}^{(2)}, \quad (4)$$

$$\gamma'_2 = -\frac{1}{3} A_{\Gamma_{8'}} + \frac{1}{3} C_{\Gamma_{8'}} + \frac{2}{3} D_{\Gamma_{8'}}^{(3)}, \quad (5)$$

$$\gamma'_3 = -\frac{1}{3} A_{\Gamma_{8'}} - \frac{1}{3} C_{\Gamma_{8'}} + \frac{1}{3} D_{\Gamma_{8'}}^{(1)}. \quad (6)$$

При записи выражений (4)–(6) было учтено, что зона $\Gamma_{8'}$ описывается волновой функцией, координатная часть

которой есть функция p -типа. В выражениях (4)–(6) фигурируют следующие суммы:

$$A_{\Gamma_{8'}} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_6} \frac{(A_{\Gamma_6 \Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6}}, \quad (7)$$

$$C_{\Gamma_{8'}} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_7} \frac{(C_{\Gamma_7 \Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7}}, \quad (8)$$

$$D_{\Gamma_{8'}}^{(1)} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_8} \frac{(D_S^{\Gamma_{8'} \Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8}}, \quad (9)$$

$$D_{\Gamma_{8'}}^{(2)} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_8} \frac{(D_A^{\Gamma_{8'} \Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8}}, \quad (10)$$

$$D_{\Gamma_{8'}}^{(3)} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_8} \frac{D_S^{\Gamma_{8'} \Gamma_8} D_A^{\Gamma_{8'} \Gamma_8}}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8}}, \quad (11)$$

где m — масса электрона.

Сумма $A_{\Gamma_{8'}}$ характеризует связь зоны $\Gamma_{8'}$ со всеми другими зонами представления Γ_6 , сумма $C_{\Gamma_{8'}}$ связывает зону $\Gamma_{8'}$ со всеми другими зонами представления Γ_7 , а суммы $D_{\Gamma_{8'}}^{(1)}, D_{\Gamma_{8'}}^{(2)}, D_{\Gamma_{8'}}^{(3)}$ характеризуют взаимодействие зоны $\Gamma_{8'}$ с другими зонами представления Γ_8 . Приведенные матричные элементы $A_{\Gamma_6 \Gamma_{8'}}, C_{\Gamma_7 \Gamma_{8'}}, D_S^{\Gamma_{8'} \Gamma_8}, D_A^{\Gamma_{8'} \Gamma_8}$ определены правилами отбора в [1], и там же они выписаны в явном виде. В рассматриваемой нами обобщенной пятизонной модели [5] суммы (7), (8) записываются следующим образом:

$$A_{\Gamma_{8'}} = \frac{1}{m} \frac{(A_{\Gamma_6 \Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6}} = \frac{(P')^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6})}, \quad (12)$$

$$C_{\Gamma_{8'}} = \frac{1}{m} \frac{(C_{\Gamma_7 \Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7}} + \frac{1}{m} \frac{(C_{\Gamma_7 \Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7}} = \frac{(C_{\Gamma_7 \Gamma_{8'}})^2}{m \Delta_0^2} \times \frac{E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_7}}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7}} + \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})}. \quad (13)$$

Здесь

$$P' = -i \langle s | p_x | x_{\Gamma_{8'}} \rangle, \quad (14)$$

$$Q = -i \langle x | p_y | z' \rangle, \quad (15)$$

p_x, p_y, p_z — компоненты оператора импульса, x, y, z — координатные функции p -типа, связанные с валентными зонами $\Gamma_7, \Gamma_8, x', y', z'$ — координатные функции p -типа, характеризующие зоны проводимости $\Gamma_7, \Gamma_{8'}$, s — координатная волновая функция s -типа электронов в зоне Γ_6 , $x_{\Gamma_{8'}}$ — координатная функция электрона в зоне $\Gamma_{8'}$ с учетом спин-орбитального смешивания с зоной Γ_8

$$|x_{\Gamma_{8'}}\rangle = C_{\Gamma_8 \Gamma_{8'}} |x'\rangle + C_{\Gamma_8 \Gamma_4} |x\rangle. \quad (16)$$

Коэффициенты смешивания $C_{\Gamma_8 \Gamma_{8'}}, C_{\Gamma_8 \Gamma_4}$ вычислены в работе [5].

При выводе (13) было использовано соотношение

$$(C_{\Gamma_7 \Gamma_{8'}})^2 + (C_{\Gamma_7 \Gamma_8})^2 = Q^2. \quad (17)$$

Это соотношение выведено в Приложении.

Далее показано, что первое слагаемое в (13) обусловлено исключительно спин-орбитальным смешиванием и потому релятивистски мало по сравнению со вторым слагаемым. Поэтому при вычислении нерелятивистских параметров Латинжера можно считать, что

$$C_{\Gamma_{8'}} = \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})}. \quad (18)$$

Как было показано в [5], среди сумм (9)–(11) в рассматриваемой модели зон существенную роль играет только сумма (10). Остальные суммы формируются за счет взаимодействия с далекими зонами, которые в настоящей работе во внимание не принимаются. Используя результаты работы [5] и выражения для приведенных матричных элементов, выведенных в [1], можно заключить, что в рассматриваемой ситуации

$$D_{\Gamma_{8'}}^{(2)} = \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})}, \quad (19)$$

где матричный элемент Q дается формулой (15). Вывод выражения (19) приведен в Приложении.

С учетом формул (12), (18), (19) выражения для параметров Латинжера (4)–(6) можно записать в виде

$$\gamma'_1 = -1 - \frac{2}{3} \frac{(P')^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6})} - \frac{2}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})} - \frac{2}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})}, \quad (20)$$

$$\gamma'_2 = -\frac{1}{3} \frac{(P')^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6})} + \frac{1}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})}, \quad (21)$$

$$\gamma'_3 = -\frac{1}{3} \frac{(P')^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6})} - \frac{1}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})}. \quad (22)$$

Как показано далее, параметры Латинжера в зоне проводимости (20)–(22) удивительным образом выражаются через параметры Латинжера в валентной зоне. Для этого обратимся к выражениям для параметров Латинжера в зоне Γ_8 . Они будут даваться формулами (4)–(6), если заменить в последних $\Gamma_{8'} \rightarrow \Gamma_8$. Суммы C_{Γ_8} , $D_{\Gamma_8}^{(1)}$, $D_{\Gamma_8}^{(2)}$, $D_{\Gamma_8}^{(3)}$ для зоны Γ_8 анализировались в [5]. Там было установлено, что в рассматриваемой пятizonной модели существенны следующие суммы:

$$C_{\Gamma_8} = \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7})}, \quad (23)$$

$$D_{\Gamma_8}^{(2)} = \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}})}. \quad (24)$$

Формулы (23), (24) получены в пренебрежении релятивистски малыми членами и без учета взаимодействия зоны Γ_8 с зонами, выходящими за рамки пятizonной модели.

Сумма A_{Γ_8} в нашей ситуации определяется одним слагаемым [1,2]

$$A_{\Gamma_8} = \frac{P^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6})}, \quad (25)$$

где

$$P = -i \langle s | p_x | x_{\Gamma_8} \rangle. \quad (26)$$

Учитывая (23), (24), (25), можно написать

$$\gamma_1 = -1 - \frac{2}{3} \frac{P^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6})} - \frac{2}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}})} - \frac{2}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7})}, \quad (27)$$

$$\gamma_2 = -\frac{1}{3} \frac{P^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6})} + \frac{1}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}})}, \quad (28)$$

$$\gamma_3 = -\frac{1}{3} \frac{P^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6})} - \frac{1}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}})}. \quad (29)$$

Уравнения (20)–(22) и (27)–(29) позволяют найти выражения для параметров Латинжера в зоне проводимости $\Gamma_{8'}$. Далее приводится подробный вывод выражения γ'_1 . Остальные параметры вычисляются аналогично.

Сумма выражений (20) и (27) приводит к соотношению

$$\gamma'_1 + \gamma_1 = -2 - \frac{2}{3} \frac{(P')^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6})} - \frac{2}{3} \frac{P^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6})} - \frac{2}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})} - \frac{2}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}})}. \quad (30)$$

Последние два слагаемых в (30) дают выражение

$$-\frac{2}{3} \frac{Q^2}{m} \left(\frac{1}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7}} + \frac{1}{E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}}} \right) = -\frac{2}{3} \frac{Q^2(\Delta_0 + \Delta'_0)}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_{8'}})}, \quad (31)$$

которое содержит релятивистски малую величину порядка $\frac{\Delta_0}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8}} \ll 1$. В дальнейшем при вычислении нерелятивистских величин мы пренебрегаем малыми слагаемыми такого порядка. По этой причине мы можем переписать (30) в виде

$$\gamma'_1 + \gamma_1 = -2 + \frac{2}{3} A_{\Gamma_6}, \quad (32)$$

$$A_{\Gamma_6} = \frac{1}{m} \left(\frac{P^2}{E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8}} + \frac{(P')^2}{E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_{8'}}} \right). \quad (33)$$

Сумма (32) в точности совпадает в рассматриваемой модели зон с одной из сумм, характеризующих зону проводимости Γ_6 [1,2], а именно

$$A_{\Gamma_6} = \frac{1}{2} \frac{m}{m_{\Gamma_6}} - \frac{1}{4} g_{\Gamma_6}. \quad (34)$$

Здесь m_{Γ_6} , g_{Γ_6} — эффективная масса и g -фактор электрона в зоне Γ_6 соответственно. Аналогичным образом

можно показать, что и другие параметры Латинжера γ'_2, γ'_3 выражаются через сумму A_{Γ_6} . Окончательно мы приходим к следующим выражениям:

$$\gamma'_1 = -2 - \gamma_1 + \frac{1}{3} \frac{m}{m_{\Gamma_6}} - \frac{1}{6} g_{\Gamma_6}, \quad (35)$$

$$\gamma'_2 = -\gamma_2 + \frac{1}{6} \frac{m}{m_{\Gamma_6}} - \frac{1}{12} g_{\Gamma_6}, \quad (36)$$

$$\gamma'_3 = -\gamma_3 + \frac{1}{6} \frac{m}{m_{\Gamma_6}} - \frac{1}{12} g_{\Gamma_6}. \quad (37)$$

4. g -факторы электронов в зоне проводимости $\Gamma_{8'}$

g -факторы электронов в зоне, связанной с представлением Γ_8 , вводятся через линейный по магнитному \mathbf{H} член в гамильтониане

$$H = -2\mu_0 [\kappa \mathbf{JH} + q(J_x^3 H_x + J_y^3 H_y + J_z^3 H_z)], \quad (38)$$

где μ_0 — магнетон Бора.

Здесь роль g -факторов играют безразмерные параметры Латинжера κ и q . Покажем, что эти параметры в зоне $\Gamma_{8'}$ с помощью правил сумм [1,2] в пятизонной модели можно выразить через известные экспериментальные величины. Параметр κ' в зоне проводимости $\Gamma_{8'}$ в рассматриваемой нами модели зон выражается через суммы следующим образом [1,2]:

$$\kappa' = -\frac{1}{3} - \frac{1}{3} A_{\Gamma_{8'}} + \frac{10}{9} C_{\Gamma_{8'}} - \frac{7}{9} D_{\Gamma_{8'}}^{(2)}. \quad (39)$$

Используя выражения (12), (18), (19) и отбрасывая релятивистски малые слагаемые, из (39) получаем

$$\kappa' = -\frac{1}{3} - \frac{1}{3} \frac{(P')^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_6})} + \frac{1}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})}. \quad (40)$$

С другой стороны, выражение для κ в валентной зоне Γ_8 имеет вид

$$\kappa = -\frac{1}{3} - \frac{1}{3} \frac{P^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6})} + \frac{1}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7})}. \quad (41)$$

Соотношение (41) получено из (39) заменой $\Gamma_{8'} \rightarrow \Gamma_8$ и использованием выражений (23)–(25). Складывая (40) и (41) и пренебрегая релятивистски малыми слагаемыми, получаем

$$\kappa' + \kappa = -\frac{2}{3} + \frac{1}{3} A_{\Gamma_6}, \quad (42)$$

где A_{Γ_6} дается выражением (33). Подставляя в (42) выражение (34), получаем

$$\kappa' = -\frac{2}{3} - \kappa + \frac{1}{6} \frac{m}{m_{\Gamma_6}} - \frac{1}{12} g_{\Gamma_6}. \quad (43)$$

Другой параметр Латинжера q' , играющий роль g -фактора в зоне $\Gamma_{8'}$, в модели пяти зон записывается в виде [1,2]

$$q' = -\frac{4}{9} C_{\Gamma_{8'}} + \frac{4}{9} D_{\Gamma_{8'}}^{(2)}. \quad (44)$$

Используя выражения (13), (19), из (44) можно получить

$$q' = -\frac{4}{9} \frac{(C^{\Gamma_{7'}\Gamma_{8'}})^2 E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7}}{m\Delta'_0 (E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})} + \frac{4}{9} \frac{\Delta_0 Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})}. \quad (45)$$

Матричный элемент $C^{\Gamma_{7'}\Gamma_{8'}}$ вычисляется помощью волновых функций для зон $\Gamma_{7'}$ и $\Gamma_{8'}$, полученных в [5]. Вычисления приводят к результату

$$C^{\Gamma_{7'}\Gamma_{8'}} = \frac{\Delta^- QF}{\sqrt{(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_7})}}. \quad (46)$$

Здесь Δ^- — величина спин-орбитального смешивания, F — функция, зависящая от Δ^- и близкая к единице. Эти величины подробно обсуждаются в [5]. Отметим, что результат (46) в точности совпадает с выражением для матричного элемента $C^{\Gamma_{7'}\Gamma_8}$, полученными в [5]. С учетом (46) выражение (45) можно записать в виде

$$q' = \frac{4}{9} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7})} \left[\Delta_0 - \frac{(\Delta^-)^2 F^2}{\Delta'_0} \right]. \quad (47)$$

Ранее в работе [5] было получено выражение для параметра q в валентной зоне

$$q = \frac{4}{9} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_8})(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})} \left[\Delta'_0 - \frac{(\Delta^-)^2 F^2}{\Delta_0} \right]. \quad (48)$$

Из полученных результатов видно, что параметры q' и q являются чисто релятивистскими. Сравнивая соотношения (47), (48), приходим к выводу

$$q' = \frac{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7}} \frac{\Delta_0}{\Delta'_0} q. \quad (49)$$

5. Эффективная масса и g -фактор электрона в зоне проводимости $\Gamma_{7'}$

Правила сумм, выведенные в [2], позволяют в принятой нами модели зон выразить эффективную массу и g -фактор электрона в зоне $\Gamma_{7'}$ через наблюдательные величины. Покажем это вначале для эффективной массы $m_{\Gamma_{7'}}$. Эффективная масса электрона в зоне проводимости $\Gamma_{7'}$ выражается через суммы соотношением [1,2]

$$\frac{m}{m_{\Gamma_{7'}}} = 1 + \frac{2}{3} B_{\Gamma_{7'}} + \frac{4}{3} C_{\Gamma_{7'}}, \quad (50)$$

где

$$B_{\Gamma_{7'}} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_6} \frac{(B^{\Gamma_6 \Gamma_{7'}})^2}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_6}}, \quad (51)$$

$$C_{\Gamma_{7'}} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_8} \frac{(C^{\Gamma_{7'} \Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}}, \quad (52)$$

Суммы (51), (52) характеризуют взаимодействие зоны $\Gamma_{7'}$ со всеми другими зонами представлений Γ_6 , Γ_8 соответственно.

В используемой нами модели зон

$$B_{\Gamma_{7'}} = \frac{1}{m} \frac{(R')^2}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_6}}, \quad R' = -i \langle s | p_x | x_{\Gamma_{7'}} \rangle, \quad (53)$$

$$C_{\Gamma_{7'}} = \frac{1}{m} \frac{(C^{\Gamma_{7'} \Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_{8'}}} + \frac{1}{m} \frac{(C^{\Gamma_{7'} \Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}}. \quad (54)$$

Учитывая соотношение

$$(C^{\Gamma_{7'} \Gamma_{8'}})^2 + (C^{\Gamma_{7'} \Gamma_8})^2 = Q^2, \quad (55)$$

которое выведено в Приложении, выражение (54) можно записать в виде

$$C_{\Gamma_{7'}} = -\frac{(C^{\Gamma_{7'} \Gamma_{8'}})^2}{m \Delta_0} \frac{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8}}{E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8}} + \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})}. \quad (56)$$

Из (46) следует, что первое слагаемое в (56) релятивистски мало, и потому его можно не учитывать при подстановке (53) и (56) в (50). В итоге получаем

$$\frac{m}{m_{\Gamma_{7'}}} = 1 + \frac{2}{3} \frac{(R')^2}{m(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_6})} + \frac{4}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})}. \quad (57)$$

Выражение для эффективной массы электрона m_{Γ_7} в зоне Γ_7 записывается аналогично (50) [1,2]

$$\frac{m}{m_{\Gamma_7}} = 1 + \frac{2}{3} B_{\Gamma_7} + \frac{4}{3} C_{\Gamma_7}, \quad (58)$$

где

$$B_{\Gamma_7} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_6} \frac{(B^{\Gamma_6 \Gamma_7})^2}{E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_6}}, \quad (59)$$

$$C_{\Gamma_7} = \frac{1}{m} \sum_{\Gamma_8} \frac{(C^{\Gamma_7 \Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_8}}. \quad (60)$$

В нашей модели пяти зон суммы (59), (60) приобретают вид

$$B_{\Gamma_7} = \frac{(B^{\Gamma_6 \Gamma_7})^2}{m(E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_6})} = \frac{R^2}{m(E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_6})}, \quad R = -i \langle s | p_x | x_{\Gamma_7} \rangle, \quad (61)$$

$$\begin{aligned} C_{\Gamma_7} &= \frac{1}{m} \frac{(C^{\Gamma_7 \Gamma_8})^2}{E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_8}} + \frac{1}{m} \frac{(C^{\Gamma_7 \Gamma_{8'}})^2}{E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_{8'}}} \\ &= -\frac{(C^{\Gamma_7 \Gamma_8})^2}{m \Delta_0} \frac{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8}}{E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_7}} + \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_{8'}})}. \end{aligned} \quad (62)$$

При выходе (62) учтено соотношение

$$(C^{\Gamma_7 \Gamma_8})^2 + (C^{\Gamma_7 \Gamma_{8'}})^2 = Q^2, \quad (63)$$

которое получено в Приложении.

Подставляя (61), (62) и отбрасывая релятивистски малое первое слагаемое в (62), получаем

$$\frac{m}{m_{\Gamma_7}} = 1 + \frac{2}{3} \frac{R^2}{m(E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_6})} + \frac{4}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_{8'}})}, \quad (64)$$

Складывая соотношения (57), (64) и пренебрегая релятивистски малыми слагаемыми, приходим к соотношению

$$\frac{m}{m_{\Gamma_{7'}}} + \frac{m}{m_{\Gamma_7}} = 2 - \frac{2}{3} B_{\Gamma_6}, \quad (65)$$

где

$$B_{\Gamma_6} = \frac{R^2}{m(E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_7})} + \frac{(R')^2}{m(E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_{7'}})}. \quad (66)$$

Сумма (66) в модели пяти зон в точности совпадает с одной из сумм, характеризующих зону Γ_6 [2], а именно

$$B_{\Gamma_6} = -\frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{m}{m_{\Gamma_6}} + g_{\Gamma_6} \right). \quad (67)$$

Подставляя (67) в (65), окончательно получаем

$$\frac{m}{m_{\Gamma_{7'}}} = 3 - \frac{m}{m_{\Gamma_7}} - \frac{1}{3} \left(\frac{m}{m_{\Gamma_6}} + g_{\Gamma_6} \right). \quad (68)$$

Перейдем теперь к рассмотрению g-фактора электрона в зоне $\Gamma_{7'}$, который мы будем обозначать символом $g_{\Gamma_{7'}}$. Как показано в работе [2], эта величина выражается через суммы следующим образом:

$$g_{\Gamma_{7'}} = -\frac{2}{3} + \frac{4}{3} B_{\Gamma_{7'}} - \frac{4}{3} C_{\Gamma_{7'}}. \quad (69)$$

В модели пяти зон с принятой нами точностью это выражение может быть записано в виде

$$g_{\Gamma_{7'}} = -\frac{2}{3} + \frac{4}{3} \frac{(R')^2}{m(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_6})} - \frac{4}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_{7'}} - E_{\Gamma_8})}. \quad (70)$$

При выводе (7) были учтены формулы (53), (54), (56).

Аналогичная величина для зоны Γ_7 в рассматриваемой нами ситуации записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} g_{\Gamma_7} &= -\frac{2}{3} + \frac{4}{3} B_{\Gamma_7} - \frac{4}{3} C_{\Gamma_7} \\ &= -\frac{2}{3} + \frac{4}{3} \frac{R^2}{m(E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_6})} - \frac{4}{3} \frac{Q^2}{m(E_{\Gamma_7} - E_{\Gamma_{8'}})}. \end{aligned} \quad (71)$$

Здесь были использованы формулы (61), (62).

Складывая выражения (70) и (71) и отбрасывая релятивистски малые слагаемые, получаем

$$g_{\Gamma_{7'}} + g_{\Gamma_7} = -\frac{4}{3} + \frac{4}{3} B_{\Gamma_6}, \quad (72)$$

где под символом B_{Γ_6} понимается сумма (66). С другой стороны, учитывая (67), окончательно получаем

$$g_{\Gamma_{7'}} = \frac{2}{3} - g_{\Gamma_7} - \frac{2}{3} \left(\frac{m}{m_{\Gamma_6}} + g_{\Gamma_6} \right), \quad (73)$$

6. Численные оценки зонных параметров и g -факторов электронов в возбужденных зонах проводимости в полупроводниках $A^{III}B^V$ вблизи Γ -точки

В настоящем разделе на основе известных экспериментальных данных о зонах Γ_7 , Γ_8 , Γ_6 , приведенных в табл. 1, делаются численные оценки зонных параметров и g -факторов для зон $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{8'}$ в полупроводниках $A^{III}B^V$. Расчеты проводятся по формулам (35)–(37), (43), (68), (73). Параметр q' , выражаемый формулой (49), оценивается только с точностью до коэффициента пропорциональности, поскольку, по мнению авторов, нет надежных сведений о параметре q , которые бы учитывали спин-орбитальное смешивание. Учет последнего обстоятельства для параметра q является важным, как это показал эксперимент [8]. Вычисления указанных выше параметров выполнены для пяти материалов, и результаты приведены в табл. 2. Данные табл. 1 брались

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

Параметр	Материал				
	InSb	InAs	InP	GaSb	GaAs
E_0 , eV	0.235	0.42	1.424	0.813	1.519
Δ_0 , eV	0.803	0.38	0.108	0.76	0.34
E'_0 , eV	3.39	4.39	4.6	3.3	4.488
Δ'_0 , eV	0.39	0.19	0.50	0.33	0.171
$\frac{m_{\Gamma_6}}{m}$	0.014	0.025	0.08	0.041	0.067
$\frac{m_{\Gamma_7}}{m}$	-0.1	-0.089	-0.121	-0.15	-0.15
g_{Γ_6}	-51.3	-14.8	1.48	-9.1	-0.44
g_{Γ_7}	-10	-13.0	-1.95	-6.2	-4.9
κ	17	7.68	1.47	3.5	1.72
q	0.39	0.04	0.02	0.13	0.04
γ_1	40.1	19.67	5.05	13.2	6.85
γ_2	18.1	8.37	1.6	4.4	2.10
γ_3	19.2	9.29	1.73	5.7	2.90

Таблица 2. Зонные параметры и g -факторы электронов в возбужденных зонах проводимости в полупроводниках $A^{III}B^V$

Параметр	Материал				
	InSb	InAs	InP	GaSb	GaAs
γ'_1	-9.74	-5.87	-3.13	-5.593	-3.803
γ'_2	-1.92	-0.47	0.36	0.403	0.423
γ'_3	-3.02	-1.39	0.23	-0.897	-0.377
κ'	-1.487	-0.447	-0.177	0.636	0.136
q'	1.523 q	1.770 q	0.191 q	1.731 q	1.785 q
$\frac{m_{\Gamma_{7'}}}{m}$	0.159	0.171	0.151	0.217	0.207
$g_{\Gamma_{7'}}$	-2.746	-3.133	-6.703	-3.253	-4.086

Таблица 3. Эффективные массы тяжелых (m_{he}) и легких (m_{le}) электронов в возбужденных зонах проводимости в полупроводниках $A^{III}B^V$

Материал	$\frac{m_{he}}{m}$	$\frac{m_{le}}{m}$
InSb	0.169 $\langle 100 \rangle$	0.074 $\langle 100 \rangle$
	0.270 $\langle 111 \rangle$	0.063 $\langle 111 \rangle$
InAs	0.203 $\langle 100 \rangle$	0.147 $\langle 100 \rangle$
	0.324 $\langle 111 \rangle$	0.116 $\langle 111 \rangle$
InP	0.415 $\langle 100 \rangle$	0.260 $\langle 100 \rangle$
	0.374 $\langle 111 \rangle$	0.279 $\langle 111 \rangle$
GaSb	0.209 $\langle 100 \rangle$	0.156 $\langle 100 \rangle$
	0.263 $\langle 111 \rangle$	0.135 $\langle 111 \rangle$
GaAs	0.338 $\langle 100 \rangle$	0.215 $\langle 100 \rangle$
	0.328 $\langle 111 \rangle$	0.219 $\langle 111 \rangle$

из [9]. В табл. 3 собраны сведения об эффективных массах тяжелых (m_{he}) и легких (m_{le}) электронов в зоне $\Gamma_{8'}$. Эти сведения получаются из формул (1)–(3)

$$\frac{m}{m_{he}} = -\gamma'_1 - 2|\gamma'_2|g, \quad (74)$$

$$\frac{m}{m_{le}} = -\gamma'_1 + 2|\gamma'_2|g. \quad (75)$$

Приложение

В рассматриваемой нами модели пяти зон p -состояния в зонах Γ_7 , Γ_8 , $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{8'}$ формируются с учетом спин-орбитального смешивания

$$|x_{\Gamma_7}\rangle = C_{\Gamma_7\Gamma_4}|x\rangle + C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}}|x'\rangle, \quad (\text{П1})$$

$$|x_{\Gamma_8}\rangle = C_{\Gamma_8\Gamma_4}|x\rangle + C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}}|x'\rangle, \quad (\text{П2})$$

$$|x_{\Gamma_{7'}}\rangle = C_{\Gamma_{7'}\Gamma_{4'}}|x'\rangle + C_{\Gamma_{7'}\Gamma_4}|x\rangle, \quad (\text{П3})$$

$$|x_{\Gamma_{8'}}\rangle = C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}}|x'\rangle + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4}|x\rangle. \quad (\text{П4})$$

Аналогичные соотношения имеют место и для гармоник $|y\rangle$, $|z\rangle$. Волновые функции $|x\rangle$ и $|x'\rangle$ описывают состояния в зонах Γ_7 , Γ_8 и $\Gamma_{7'}$, $\Gamma_{8'}$ в отсутствие спин-орбитального смешивания. Коэффициенты смешивания в (П1)–(П4) полагаются вещественными [1], и они удовлетворяют условиям [5]

$$C_{\Gamma_8\Gamma_4} = C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}}, \quad C_{\Gamma_7\Gamma_4} = C_{\Gamma_{7'}\Gamma_{4'}}, \quad (\text{П5})$$

$$C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}} = -C_{\Gamma_{7'}\Gamma_4}, \quad C_{\Gamma_8\Gamma_4} = -C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}}. \quad (\text{П6})$$

Функции (П1)–(П4) предполагаются нормированными на единицу, т.е. суммы квадратов коэффициентов во всех выражениях (П1)–(П4) равны единице.

Соотношения (17), (53), (63) непосредственно следуют из соотношений (П1)–(П6) и условия нормировки.

Покажем это на примере соотношения (17). Матричные элементы, входящие в (17), записываются в виде [1]

$$C^{\Gamma_7\Gamma_{8'}} = i\langle x_{\Gamma_7} | p_y | z_{\Gamma_{8'}} \rangle, \quad (\text{П7})$$

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = i\langle x_{\Gamma_7} | p_y | z_{\Gamma_8} \rangle. \quad (\text{П8})$$

Используя выражения (П1)–(П4), получаем

$$C^{\Gamma_7\Gamma_{8'}} = (C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}} C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4} - C_{\Gamma_7\Gamma_4} C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}}) Q, \quad (\text{П9})$$

$$C^{\Gamma_7\Gamma_8} = (C_{\Gamma_7\Gamma_{4'}} C_{\Gamma_8\Gamma_4} - C_{\Gamma_7\Gamma_4} C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}}) Q, \quad (\text{П10})$$

При выводе (П9), (П10) были использованы соотношения [10]

$$\langle x | p_y | z \rangle = \langle x' | p_y | z' \rangle = 0.$$

Возводя (П9) и (П10) в квадрат и складывая их с учетом (П5), (П6) и условия нормировки, получаем

$$(C^{\Gamma_7\Gamma_{8'}})^2 + (C^{\Gamma_7\Gamma_8})^2 = Q^2. \quad (\text{П11})$$

Соотношения (55), (63) выводятся аналогично.

Из результатов работы [5] следует, что в модели пяти зон

$$D_{\Gamma_{8'}}^{(2)} = \frac{(i\langle x_{\Gamma_{8'}} | p_y | z_{\Gamma_8} \rangle)^2}{m(E_{\Gamma_{8'}} - E_{\Gamma_8})}. \quad (\text{П12})$$

Но учитывая, что матричный элемент в (П12) имеет вид

$$\begin{aligned} i\langle x_{\Gamma_{8'}} | p_y | z_{\Gamma_8} \rangle &= i\langle C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}} x' + C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4} x | p_y | C_{\Gamma_8\Gamma_4} z + C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}} z' \rangle \\ &= (C_{\Gamma_{8'}\Gamma_{4'}} C_{\Gamma_8\Gamma_4} - C_{\Gamma_{8'}\Gamma_4} C_{\Gamma_8\Gamma_{4'}}) Q, \end{aligned} \quad (\text{П13})$$

и, возводя выражение (П13) в квадрат, затем подставляя его в (П12) и принимая во внимание соотношения (П5), (П6) и условия нормировки, получаем соотношение (19).

Авторы благодарят Е.Л. Ивченко за стимулирующие дискуссии, Г.Г. Зегрю за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] В.Д. Дымников. ФТТ **43**, 11, 1957 (2001).
- [2] В.Д. Дымников. ФТТ **47**, 4, 591 (2005).
- [3] В.Д. Дымников, О.В. Константинов. ФТП **42**, 8, 934 (2008).
- [4] И.М. Цидильковский. Зонная структура полупроводников. Наука, М. (1978).
- [5] В.Д. Дымников, О.В. Константинов. ФТТ **51**, 4, 000 (2009).
- [6] Оптические свойства полупроводников / Под ред. Р. Уилларюсона, А. Бира. Мир, М. (1970).
- [7] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 4, 1030 (1956).
- [8] X. Marie, T. Amand, P. Le Jeune, M. Pailard, P. Renucci, L.E. Golub, V.D. Dymnikov, E.L. Ivchenko. Phys. Rev. B **60**, 8, 5811 (1999).
- [9] Landol-Bornstein tables / Eds O. Madelung, M. Shuls, H. Weiss. Springer, Berlin (1982). V. 17a.
- [10] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).