

4. В.И. Кадушкин, Е.Л. Шанина. // ФТП. – 1996. – т. 30. – С. 1676.
5. Ю.Ю. Бачеріков, Б.Д. Нечипорук, О.Б. Охріменко // УФЖ.– 1998.– Т.43.– С. 329.
6. В.В. Осипов, А.Ю. Селяков // ФТП. – 1998. – т. 32. – С. 221.
7. В.В. Осипов, А.Ю. Селяков // ФТП. – 1999. – т. 33. – С. 101.
8. Ю.А. Тхорык, Л.С. Хазан. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. – К.: Наукова думка, 1983. –С. 304.
9. Рудницький С.В., Пелещак Р.М. Спектри носіїв δ -легованих кремнієм шарів GaAs (100). // Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”. – 2001. – № 430. – С. 77-83.
10. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. – М., 1989. – 240 С.

УДК 537.311.322

- Сиротюк С.В.¹⁾, Кинаш Ю.Є.¹⁾, Краєвський С.Н.²⁾
¹⁾ Національний університет “Львівська політехніка”,
 кафедра напівпровідникової електроніки,
²⁾ Український державний лісотехнічний університет

РОЗРАХУНОК МАТРИЦІ ПОТЕНЦІАЛУ СПІН-ОРБІТАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ОСНОВІ ЗМІШАНОГО БАЗИСУ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛАХ

© Сиротюк С.В.¹⁾, Кинаш Ю.Є.¹⁾, Краєвський С.Н.,²⁾ 2003

S.V. Syrotyuk, Yu.E. Kynash, S.N. Kraevsky

THE EVALUATION OF MATRIX OF THE SPIN-ORBITAL INTERACTION POTENTIAL ON MIXED BASIS IN SEMICONDUCTOR CRYSTALS

Syrotyuk S.V., Kynash Yu.E., Kraevsky S.N., 2003

Виведені розрахункові алгоритми матриці потенціалу спіно-орбітальної взаємодії для кристалів зі складними елементарними комірками у змішаному базисі одночастинкових станів, що складається з функцій Блоха атомних серцевин і плоских хвиль. Порівняні методики введення потенціалу спіно-орбітальної взаємодії у підходах атомного апріорного псевдопотенціалу та в змішаному базисі. Стверджується послідовніший характер розрахунку потенціалу спіно-орбітальної взаємодії у методі змішаного базису, порівняно з псевдопотенціальним наближенням.

The algorithms of the spin-orbital interaction matrix have been derived for crystals with complex structure within the mixed basis of one-particle states, including core Bloch states and plane waves. The comparison of methods of the spin-orbital interaction potential inclusion, derived within *ab initio* atomic pseudopotential approach and with mixed basis has been made. The much consecutiveness of the mixed basis approach in spin-orbital interaction potential evaluation has been stated as compared to pseudopotential approximation.

Вступ. Відомо, що параметр спіно-орбітального розщеплення Δ_0 дорівнює 0,006 eВ у алмазі, 0,29 eВ у Ge, 0,48 eВ у Sn, 0,80 eВ у GaSb і 0,93 eВ у ZnTe. Однак навіть у алмазі нехтування ним призведе до злиття р-зон, які формують стелю валентної зони, а отже, і до втрати інформації про стани важких і легких дірок у ній.

На сьогодні найсистематичніша можливість врахування спіно-орбітальної взаємодії надається параметризованими функціями, виведеними з атомних апріорних псевдопотенціалів [1–3]. У [4] отримані розрахункові алгоритми включення спіно-орбітальної взаємодії в схему розрахунку параметрів електронних енергетичних зон на основі теорії збурення. Спочатку розв'язується секулярна задача без спіно-орбітальної взаємодії, а на другому етапі шукаються розв'язки, збурені нею. Відзначаючи успішність підходу [4], зауважуємо, що його результати є подекуди суперечливі. Наприклад, для кристала InSb врахування внесків р-симетрії у потенціалі спіно-орбітальної взаємодії дає досить добрі значення розщеплень енергетичних рівнів, тоді як наступне включення d-складових призводить до помітного їхнього погіршення.

Недолік цього підходу в тому, що параметри спіно-орбітальної взаємодії визначені з потенціалу вільного атома, тобто немає можливості врахувати їхню зміну в кристалі, зумовлену сусідніми атомами з тим самим чи іншим атомним номером. Отже, вони не залежать від кристалічного потенціалу, що позбавляє можливості виконання послідовних самоузгоджених розрахунків енергетичних зон.

Ми пропонуємо послідовнішу схему розрахунку електронного енергетичного спектра кристалів, у якій потенціал спіно-орбітальної взаємодії залежить від складу сполуки, тобто визначається на основі кристалічного потенціалу.

1. Секулярне рівняння в змішаному базисі з урахуванням спіна. Розглядаємо змішаний базис одночастинкових станів з урахуванням спіна

$$\{ |k\alpha\mu\rangle, |k+G, \mu\rangle, |k\alpha\nu\rangle, |k+G, \nu\rangle \}, \quad (1)$$

де k – квазіімпульс електрона у першій зоні Бриллюена, t – квантові числа, a – координати атома в елементарній комірці, μ, ν – функції, що відповідають орієнтаціям спіна відповідно вгору, вниз, [5]:

$$\mu = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nu = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Електронний енергетичний спектр $E_{k\alpha\lambda}$ ($\lambda = \mu, \nu$) є розв'язком рівняння Шредингера для кристала

$$H\Psi_{k\alpha\lambda}(r) = E_{k\alpha\lambda}\Psi_{k\alpha\lambda}(r), \quad (3)$$

де $H = H^0 + W$, $H^0 = T + V$ – оператор Гамільтона без спіно-орбітальної взаємодії, $T = -\nabla^2/2$ – оператор кінетичної, V – потенціальної енергії, $\Psi_{k\alpha\lambda}$ – невідома хвильова функція електрона в кристалі в зоні номер α , $W = W_{so}$ – оператор спіно-орбітальної взаємодії [5]

$$W_{so}(r, \sigma) = -i/4\sigma[\nabla V(x, y, z) \times \nabla], \quad (4)$$

у якому σ -спіновий оператор, компонентами якого є матриці Паулі

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Дія останніх на спінові функції така:

$$\sigma_x\mu = \nu, \quad \sigma_y\mu = i\nu, \quad \sigma_z\mu = \mu, \quad \sigma_x\nu = \mu, \quad \sigma_y\nu = -i\mu, \quad \sigma_z\nu = -\nu. \quad (6)$$

Хвильову функцію електрона в кристалі шукаємо в змішаному базисі:

$$\Psi_{k\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=\mu}^{\nu} \sum_t \sum_a a_{kta\lambda,\alpha} |kta\lambda\rangle + \sum_G a_{\alpha\lambda}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) |k + \mathbf{G}, \lambda\rangle, \quad (7)$$

де a – варіаційні коефіцієнти розкладу за блохівськими станами серцевини

$$|kta\lambda\rangle = N^{-1/2} \sum_A e^{ik(a+A)} \varphi_t(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \mathbf{A}) \lambda, \quad (8)$$

та плоскими хвилями

$$|k + \mathbf{G}, \lambda\rangle = \Omega^{-1/2} \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}) \lambda, \quad (9)$$

Тут $t = \{nlm\}$ є квантовими числами станів серцевини, \mathbf{a} – координати атома в елементарній комірці, \mathbf{G} – вектор оберненої ґратки, N – число елементарних комірок у кристалі, \mathbf{A} – вектори ґратки Браве, φ – хвильові функції електронів серцевини атома [6], Ω – об'єм кристала.

Підставивши (7) в (3), отримуємо систему однорідних лінійних рівнянь блокової форми

$$\begin{pmatrix} H_{\mu\mu} & W_{\mu\nu} \\ W_{\nu\mu} & H_{\nu\nu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\alpha\mu} \\ a_{\alpha\nu} \end{pmatrix} = 0, \quad (10)$$

у якій діагональні блоки відрізняються лише матричними елементами потенціалу спін-орбітальної взаємодії

$$W_{\mu\mu} = -\frac{i}{4} \left(\frac{\partial V(x,y,z)}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V(x,y,z)}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad W_{\nu\nu} = -W_{\mu\mu}, \quad (11)$$

а їхня спільна частина не залежить від спіна і має такий вигляд:

$$\begin{pmatrix} H^0_{kta,k't'a'} - ES_{kta,k't'a'} & H^0_{kta,k+G'} - ES_{kta,k+G'} \\ H^0_{k+G,k't'a'} - ES_{k+G,k't'a'} & H^0_{k+G,k+G'} - ES_{G,G'} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

а S – матриця перекривання у змішаному базисі. Недіагональні блоки в (10) містять тільки спін-орбітальну взаємодію

$$W_{\mu\nu} = \frac{-1}{4} \left(i \left(\frac{\partial V(x,y,z)}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V(x,y,z)}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial V(x,y,z)}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V(x,y,z)}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right), \quad (13)$$

$$W_{\nu\mu} = W_{\mu\nu}^+.$$

Елементи матриць H^0 , W і S розраховуємо за допомогою декартових гауссіанів аналітично [7–9].

2. Матричні елементи оператора спін-орбітальної взаємодії на змішаних станах.

Найбільш нетривіальними є результати розрахунку матричних елементів потенціалу спін-орбітальної взаємодії на змішаних станах. Якщо матричні елементи W на блохівських

станах серцевини $|kls\alpha\mu\rangle$ дорівнюють нулю, то на змішаних станах вони для обмінно-кореляційного потенціалу, зображеного за допомогою гауссіанів, відмінні від нуля і мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \langle kls\alpha\mu | W(r-c-C) | k+G \rangle = (1/2)\pi^{3/2}\Omega_c^{-(1/2)} \frac{\alpha_i\beta_j}{(\alpha_i+\beta_j)^{3/2}} ((k_x+G_x) \\ (c_y+C_y-a_y-A_y)-(k_y+G_y)(c_x+C_x-a_x-A_x)) \times \text{Exp1} \times \text{Exp2}, \end{aligned} \quad (14)$$

де

$$\text{Exp1} = e^{-i(\alpha_i k C + \beta_j (k+G)c + \beta_j k(a+A) - \alpha_i (k+G)(c+C-a-A) + \alpha_i k(a+A) + \beta_j k C + (k+G)c) / (\alpha_i + \beta_j)}, \quad (15)$$

$$\text{Exp2} = e^{(-1/4((k+G)^2 + 4\alpha_i\beta_j(c+C-a-A)^2) / (\alpha_i + \beta_j))}. \quad (16)$$

Матричні елементи потенціала спіно-орбітальної взаємодії на P_x -станах і плоских хвилях записуються так:

$$\begin{aligned} \langle kPx\alpha\mu | W(r-c-C) | k+G \rangle = (-1/4)\pi^{3/2}\Omega_c^{-(1/2)} \frac{\beta_j}{(\alpha_i+\beta_j)^{7/2}} \times \\ (-\alpha_i(k_y+G_y) + i\alpha_i(k_x+G_x)^2(c_y+C_y-a_y-A_y) + 2\alpha_i\beta_j(k_y+G_y) \times \\ (c_x+C_x-a_x-A_x)^2 - i\alpha_i(k_x+G_x)(k_y+G_y)(c_x+C_x-a_x-A_x) - \beta_j(k_y+G_y) - \\ 2\alpha_i\beta_j(k_x+G_x)(c_x+C_x-a_x-A_x)(c_y+C_y-a_y-A_y)) \times \text{Exp1} \times \text{Exp2}. \end{aligned} \quad (17)$$

На станах D_{xy} і плоских хвилях отримали вирази

$$\begin{aligned} \langle kD_{xy}\alpha\mu | W(r-c-C) | k+G \rangle = (-1/8)\pi^{3/2}\Omega_c^{-(1/2)} \frac{\beta_j}{(\alpha_i+\beta_j)^{9/2}} \times \\ (-\alpha_i(k_x+G_x)(k_y+G_y)^2(c_x+C_x-a_x-A_x) + 2i\alpha_i\beta_j(k_x+G_x)^2(c_y+C_y-a_y-A_y)^2 - \\ 4\alpha_i\beta_j^2(k_x+G_x)(c_x+C_x-a_x-A_x)(c_y+C_y-a_y-A_y)^2 - \\ 2\beta_j^2(k_y+G_y)(c_y+C_y-a_y-A_y) + i\beta_j(k_y+G_y)^2 + i\alpha_i(k_y+G_y)^2 + \\ \alpha_i(k_x+G_x)^2(k_y+G_y)(c_y+C_y-a_y-A_y) - 2i\alpha_i\beta_j(k_y+G_y)^2(c_x+C_x-a_x-A_x)^2 + \\ 4\alpha_i\beta_j^2(k_y+G_y)(c_x+C_x-a_x-A_x)^2(c_y+C_y-a_y-A_y) - \\ 2\alpha_i\beta_j(k_y+G_y)(c_y+C_y-a_y-A_y) - i\alpha_i(k_x+G_x)^2 - i\beta_j(k_x+G_x)^2 + \\ 2\alpha_i\beta_j(k_x+G_x)(c_x+C_x-a_x-A_x) + 2\beta_j^2(k_x+G_x)(c_x+C_x-a_x-A_x)) \times \\ \text{Exp1} \times \text{Exp2}. \end{aligned} \quad (18)$$

У формулах (14)–(18) \mathbf{c}, \mathbf{C} є координатами атомів, на яких центровані потенціали V , що визначають оператор спіно-орбітальної взаємодії (11), (13). Коефіцієнти α_i є орбітальними експонентами декартових гауссіанів [6], а β_j – аналогічними параметрами, що задають

апроксиманту кристалічного потенціалу [9]. Вирази на інших Р- і D-станах мають подібну структуру, і ми їх не наводимо.

3. Обговорення отриманих результатів і висновки. Розрахункові алгоритми матричних елементів потенціалу спін-орбітальної взаємодії отримані для всіх блоків матриці (10). Вони є аналітичними формулами і не містять числового інтегрування, яке дуже уповільнює виконання комп'ютерних програм з розрахунку електронних енергетичних спектрів з урахуванням спін-орбітальної взаємодії. Пропонований тут підхід є послідовнішим, порівняно з методом апріорного атомного псевдопотенціалу [1–4], у якому потенціал спін-орбітальної взаємодії нечутливий до оточення, тому що його параметри визначаються з потенціалу вільного йона. Це важливо в розрахунках електронних енергетичних спектрів сполук і твердих розчинів. У нашому підході потенціал W сполуки GaAs, що діє на одному з вузлів Ga, залежить від зарядів, локалізованих на атомах Ga та As. Наприклад, потенціал W Ga формується сумою потенціалів, центрованих на атомах Ga та As. Зміна розподілу заряду призводить до зміни потенціалу W , тоді як у методі псевдопотенціалу потенціали W Ga та As є фіксованими і не дозволяють враховувати зміни в оточенні, зумовлені введенням домішок чи зміною концентрації атомів при утворенні твердого розчину.

1. Bachelet G.B., Hamann D.R., Schlüter M. // *Phys.Rev.* 1982. В. 26. № 8. P.4199-4228.
2. Troullier N., Martins J.L. // *Phys.Rev.* 1991. В. 43. № 3. P.1993-2006.
3. Hartwigsen C., Goedecker S., Hutter J. // *Phys.Rev.* 1998. В. 58. № 7. P.3641-3662.
4. Hemstreet L.A., Fong C.Y., Nelson J.S. // *Phys. Rev.* 1993. В. 47. № 8. P. 4238-4243.
5. Бассани Ф., Парравичини Дж.П. *Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах.* – М.: Наука, 1982. – 391 с.
6. Huzinaga S., Klobukowski M. // *J.Mol.Structures.* 1988. 167. P.1-210.
7. Syrotyuk S.V., Kynash Yu.E. // *Phys.Stat.Sol.(b)* 1996. 196. № 1. P.95-101.
8. Syrotyuk S.V., Kynash Yu.E., Sobchuk I.S. // *Phys.Stat.Sol.(b)* 1997. 200. №1. P.129-136.
9. Сиротюк С.В., Кинаш Ю.Є., Краєвський С.Н., Різак В.Л. // *Вісн. Держ. ун-ту “Львівська політехніка”.* 2002. № 455. – С. 196-200.