

Chuyên đề: Cấu trúc điện tử và tính chất quang của chất rắn

Bài 3

Cấu trúc dải năng lượng: phương pháp k.p

Huỳnh Thanh Đức

30/9/2022

⑤ Phương pháp k.p

- ▶ Phương trình k.p
- ▶ Gần đúng nhiễu loạn không suy biến
- ▶ Gần đúng nhiễu loạn tựa suy biến (phương pháp phân vùng Löwdin)
- ▶ Lý thuyết k.p nhiều dải: nguồn gốc của các dải
- ▶ Mô hình k.p 2 dải
- ▶ Mô hình k.p 6 dải (Luttinger-Kohn)
- ▶ Mô hình k.p 8 dải (Kane)
- ▶ Mô hình k.p 14 dải (Kane mở rộng)
- ▶ Mô hình k.p 30 dải

Tài liệu tham khảo

- L. C. L. Y. Voon and M. Willatzen, *The $k.p$ Method* (Springer, 2009).
- Guy Fishman, *Semi-conducteurs: les bases de la théorie $k.p$* (Les édition de l'école polytechnique, 2010).
- Roland Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems* (Springer, 2003).

V. Phương pháp k.p

Phương trình k.p

Thay hàm sóng Bloch

$$|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (1)$$

vào phương trình Schrödinger một điện tử

$$H_{1e}(\mathbf{r})|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r})\right)|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (2)$$

ta được *phương trình k.p* cho hàm tuần hoàn $|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \equiv u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$H^{k.p}(\mathbf{k})|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (3)$$

trong đó

$$H^{k.p}(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H_{1e}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \quad (4)$$

Tại $\mathbf{k} = 0$, phương trình (3) trở thành

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r})\right)|u_n\rangle = \varepsilon_n^0|u_n\rangle \quad (5)$$

Phương trình k.p bao gồm tương tác spin-orbit

Nguyên tử có khối lượng càng nặng thì *tương tác spin-orbit* (SOI) càng mạnh. SOI có nguồn gốc *tương đối tính*. Để mô tả SOI, thay cho phương trình Schrödinger (2) ta sử dụng phương trình Pauli:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V_0 \times \mathbf{p}) \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{các ma trận Pauli}}}{\boldsymbol{\sigma}} \right) |\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) |\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (6)$$

Thay hàm Bloch (1) vào phương trình (6) ta được phương trình k.p (3) với Hamiltonian k.p là

$$H^{\text{k.p}}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0 \quad (7)$$

trong đó

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4mc^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0 \quad (8)$$

Do $p \gg \hbar k$ người ta thường gần đúng bỏ qua số hạng thứ hai trong (8).

Phương pháp giải phương trình k.p

Để giải phương trình k.p người ta có thể khai triển hàm riêng $|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle$ qua một tập hợp các hàm cơ sở trực chuẩn, đầy đủ $\{|u_n\rangle\}$

$$|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \sum_n a_{\nu\mathbf{k}}^n |u_n\rangle \quad (9)$$

Thông thường ta chọn $|u_n\rangle$ là các hàm riêng của phương trình (5).
Thay (9) vào phương trình k.p, nhân trái với $\langle u_m|$ ta được

$$\sum_n H_{mn}^{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{k}) a_{\nu\mathbf{k}}^n = \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) a_{\nu\mathbf{k}}^m \quad (10)$$

trong đó

$$H_{mn}^{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{k}) = \left(\varepsilon_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \delta_{mn} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn} + \Delta_{mn} \quad (11)$$

$$\mathbf{p}_{mn} = \langle u_m | \mathbf{p} | u_n \rangle, \quad \Delta_{mn} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \langle u_m | (\nabla V_0 \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} | u_n \rangle \quad (12)$$

Phương pháp giải phương trình k.p

- Nếu tập hợp các hàm cơ sở đã biết $\{|u_n\rangle\}$ đủ lớn, xem như đầy đủ:

Ta tính các yếu tố ma trận của Hamiltonian k.p (11) trong hệ cơ sở này và sau đó chéo hóa ma trận $H^{k.p}(\mathbf{k})$ để nhận được năng lượng riêng và hàm riêng cho vector sóng \mathbf{k} bất kỳ trong vùng Brillouin.

- Nếu hệ cơ sở của chúng ta nhỏ, không đầy đủ:

Xem các hàm cơ sở chưa biết là các *trạng thái xa* (remote states). Đóng góp của các trạng thái xa này được tính bởi *lý thuyết nhiễu loạn* với Hamiltonian nhiễu loạn là $\frac{\hbar}{m}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Để áp dụng gần đúng này thì \mathbf{k} phải nhỏ \Rightarrow phương pháp nhiễu loạn k.p chỉ cho phép tính cấu trúc dải năng lượng và hàm sóng trong miền không gian k gần điểm $\mathbf{k} = 0$.

Gần đúng nhiễu loạn không suy biến

Áp dụng lý thuyết nhiễu loạn không suy biến với Hamiltonian nhiễu loạn

$$H' = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$$

ta nhận được hàm riêng tính đến bậc chính nhiễu loạn bậc 1

$$|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = |u_{\nu}\rangle + \frac{\hbar}{m} \sum_{n \neq \nu} \frac{\mathbf{k} \cdot \langle u_n | \mathbf{p} | u_{\nu} \rangle}{\varepsilon_{\nu}^0 - \varepsilon_n^0} |u_n\rangle \quad (13)$$

và năng lượng riêng tính đến bậc chính nhiễu loạn bậc 2

$$\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\nu}^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{n \neq \nu} \frac{|\mathbf{k} \cdot \langle u_{\nu} | \mathbf{p} | u_n \rangle|^2}{\varepsilon_{\nu}^0 - \varepsilon_n^0} \equiv \varepsilon_{\nu}^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (14)$$

trong đó m^* là khối lượng điện tử hiệu dụng.

- Bỏ chính năng lượng bậc 1 triệt tiêu do $\langle u_{\nu} | \mathbf{p} | u_{\nu} \rangle = 0$
- Lý thuyết trên không áp dụng được nếu có suy biến $\varepsilon_n^0 = \varepsilon_{\nu}^0$

Gần đúng nhiễu loạn tựa suy biến (phân vùng Löwdin)

- Chia tập hợp cơ sở thành 2 tập hợp con $A = \{|u_\alpha\rangle\}$ và $B = \{|u_\beta\rangle\}$
- Các hàm cơ sở suy biến nằm cùng trong một tập hợp con A hoặc B . Không có suy biến giữa một hàm cơ sở thuộc A và một hàm cơ sở thuộc B .
- Ta tập trung chú ý vào tập hợp A . Tương tác trong cùng tập hợp A được mô tả chính xác. Tương tác giữa tập hợp A và B được gần đúng bởi lý thuyết nhiễu loạn.

Ta viết lại phương trình k.p (10) dưới dạng

$$\sum_n (H_{mn} - \varepsilon \delta_{mn}) a^n = \sum_{\alpha \neq m}^A H_{m\alpha} a^\alpha + \sum_{\beta \neq m}^B H_{m\beta} a^\beta + (H_{mm} - \varepsilon) a^m = 0$$
$$\Rightarrow a^m = \sum_{\alpha \neq m}^A \frac{H_{m\alpha} a^\alpha}{\varepsilon - H_{mm}} + \sum_{\beta \neq m}^B \frac{H_{m\beta} a^\beta}{\varepsilon - H_{mm}} \quad (15)$$

Thực hiện phép lặp: thay a^β trong (15) bởi chính (15) ta được

Gần đúng nhiễu loạn tự suy biến (phân vùng Löwdin)

$$a^m = \sum_{\alpha}^A \left(\frac{H_{m\alpha} a^{\alpha}}{\varepsilon - H_{mm}} - \frac{H_{m\alpha} \delta_{m\alpha} a^{\alpha}}{\varepsilon - H_{mm}} \right) + \sum_{\beta \neq m}^B \frac{H_{m\beta}}{\varepsilon - H_{mm}} \left(\sum_{\alpha}^A \frac{H_{\beta\alpha} a^{\alpha}}{\varepsilon - H_{\beta\beta}} + \sum_{\beta' \neq \beta}^B \frac{H_{\beta\beta'} a^{\beta'}}{\varepsilon - H_{\beta\beta'}} \right) \quad (16)$$

- Bỏ qua số hạng cuối chứa $a^{\beta'}$ trong (16) và chỉ quan tâm $m = \alpha' \in A$ ta có gần đúng nhiễu loạn bậc 2:

$$a^{\alpha'} = \sum_{\alpha}^A \frac{1}{\varepsilon - H_{\alpha'\alpha'}} \left(H_{\alpha'\alpha} - H_{\alpha'\alpha} \delta_{\alpha'\alpha} + \sum_{\beta}^B \frac{H_{\alpha'\beta} H_{\beta\alpha}}{\varepsilon - H_{\beta\beta}} \right) a^{\alpha} \quad (17)$$

$$\Rightarrow \sum_{\alpha}^A \left(H_{\alpha'\alpha} + \sum_{\beta}^B \frac{H_{\alpha'\beta} H_{\beta\alpha}}{\varepsilon - H_{\beta\beta}} \right) a^{\alpha} = \varepsilon a^{\alpha'} \quad (18)$$

$\varepsilon_{\alpha}^0, \varepsilon_{\alpha'}^0 \quad \varepsilon_{\beta}^0$

- Để nhận được các đóng góp bậc cao hơn, ta tiếp tục thay $a^{\beta'}$ trong (16) bởi (15) và khai triển biểu thức tương tự.

Gần đúng nhiễu loạn tự suy biến (phân vùng Löwdin)

Như vậy thay vì giải phương trình (10)

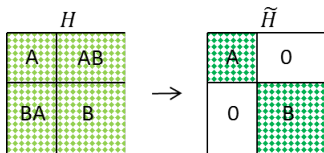
$$\sum_n H_{mn}(\mathbf{k}) a_{\nu\mathbf{k}}^n = \varepsilon_\nu(\mathbf{k}) a_{\nu\mathbf{k}}^m$$

ta giải phương trình cho tập hợp con A

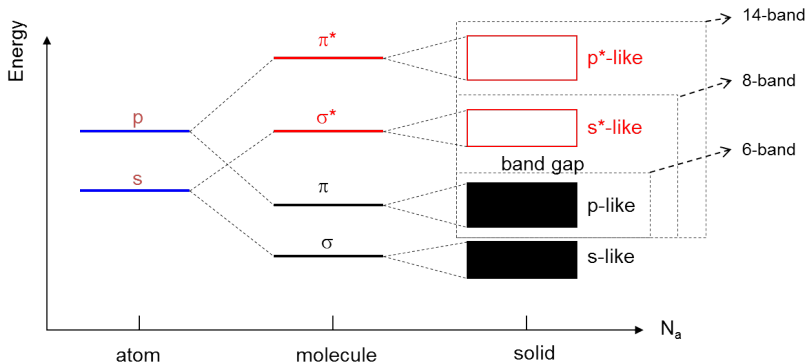
$$\sum_{\alpha}^A \tilde{H}_{\alpha'\alpha}^A(\mathbf{k}) a_{\nu\mathbf{k}}^{\alpha} = \varepsilon_\nu(\mathbf{k}) a_{\nu\mathbf{k}}^{\alpha'} \quad (19)$$

trong đó

$$\tilde{H}_{\alpha'\alpha}^A(\mathbf{k}) = H_{\alpha'\alpha}^A(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \sum_{\beta}^B H_{\alpha'\beta}^{AB}(\mathbf{k}) H_{\beta\alpha}^{BA}(\mathbf{k}) \left(\frac{1}{\varepsilon_{\alpha'}^0 - \varepsilon_{\beta}^0} + \frac{1}{\varepsilon_{\alpha}^0 - \varepsilon_{\beta}^0} \right) + \dots \quad (20)$$



Nguồn gốc của các dải năng lượng



Sự tiến triển từ các mức năng lượng orbital nguyên tử thành các dải năng lượng chất rắn

Các dải năng lượng trong chất rắn có nguồn gốc từ các mức năng lượng orbital nguyên tử. Điều này gợi ý ta chọn các hàm cơ sở (để khai triển hàm Bloch) giống như các hàm riêng của mô men xung lượng nguyên tử.

Nguồn gốc của các dải năng lượng

Trong nguyên tử, hàm riêng của mô men xung lượng L^2 và L_z là:

$$|l, m\rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (21)$$

- Orbital s :

$$|0, 0\rangle = Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \equiv |S\rangle$$

- Orbital p :

$$|1, 0\rangle = Y_1^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{z}{r} \equiv |Z\rangle,$$

$$|1, -1\rangle = Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta e^{-i\phi} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{x-iy}{r} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|X\rangle - i|Y\rangle),$$

$$|1, +1\rangle = Y_1^{+1}(\theta, \phi) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta e^{i\phi} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{x+iy}{r} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}} (|X\rangle + i|Y\rangle).$$

Nguồn gốc của các dải năng lượng

Hàm riêng của mô men xung lượng toàn phần (bao gồm spin) J^2 và J_z là:

$$|j, m_j\rangle = \sum_{m=-l}^l \sum_{s=-1/2}^{1/2} |l, m\rangle |s, s_z\rangle \langle l, m; s, s_z | j, m_j \rangle \quad (22)$$

↖ hệ số Clebsch-Gordan

- Orbital s :

$$|\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle = |0, 0\rangle |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} |S\rangle \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle = |0, 0\rangle |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ |S\rangle \end{bmatrix},$$

- Orbital p :

$$|\tfrac{3}{2}, +\tfrac{3}{2}\rangle = |1, +1\rangle |\uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$|\tfrac{3}{2}, -\tfrac{3}{2}\rangle = |1, -1\rangle |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |X\rangle \\ 0 - i|Y\rangle \end{bmatrix},$$

$$|\tfrac{3}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |1, +1\rangle |\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle |\uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2|Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix},$$

$$|\tfrac{3}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} |X\rangle - i|Y\rangle \\ 2|Z\rangle \end{bmatrix},$$

$$|\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, +1\rangle |\downarrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix},$$

$$|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle |\downarrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle |\uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |X\rangle - i|Y\rangle \\ -|Z\rangle \end{bmatrix}.$$

Mô hình k.p 2 dải

Định nghĩa các hàm cơ sở mô tả điện tử dải dẫn s^* -like bởi

$$|u_1\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} |S\rangle \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |u_2\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ |S\rangle \end{bmatrix}$$

Do các yếu tố ma trận xung lượng và các yếu tố ma trận SOI giữa các hàm cơ sở dải dẫn s^* -like bằng không, Hamiltonian k.p có dạng

$$H^{\text{CB}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{bmatrix} \quad (23)$$

Xem các trạng thái cơ sở này là tập hợp A và các trạng thái cơ sở chưa biết còn lại là tập hợp B . Áp dụng phương pháp phân vùng Löwdin khai triển tới bậc hai nhiều loạn cho tập hợp A , ta nhận được Hamiltonian khối lượng điện tử hiệu dụng cho điện tử dẫn

$$H^{\text{Eff}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \end{bmatrix} \quad (24)$$

trong đó

$$\frac{m}{m^*} = 1 - \frac{2}{m} \sum_{\beta}^B \frac{p_{S\beta}^x p_{\beta S}^x}{\varepsilon_{\beta}^0} \quad (25)$$

	GaAs	AlAs	InSb	CdTe
m^*/m	0.0665	0.150	0.0139	0.09

Mô hình k.p 6 dải (mô hình Luttinger-Kohn)

Để mô tả dải hóa trị p -like, các hàm cơ sở được định nghĩa như sau

$$\begin{aligned} |u_1\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 0 \end{bmatrix} & |u_4\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ |X\rangle - i|Y\rangle \end{bmatrix} \\ |u_2\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2|Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix} & |u_5\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix} \\ |u_3\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 2|Z\rangle \end{bmatrix} & |u_6\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |X\rangle - i|Y\rangle \\ -|Z\rangle \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Cách chọn các hàm cơ sở này thuận tiện để nghiên cứu các tinh thể có cấu trúc dựa trên mạng lập phương, khi đó người ta thường chọn hệ tọa độ với $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$, $z \parallel [001]$. Các trạng thái liên kết $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ là các hàm đối xứng (chẵn) đối với phép nghịch đảo không gian.

Các yếu tố ma trận xung lượng và SOI được biểu diễn qua các yếu tố ma trận cơ bản (bất khả quy), ví dụ:

$$\begin{aligned} \langle u_1 | p_x | u_2 \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{3}} (\langle X | p_x | Z \rangle - i \langle Y | p_x | Z \rangle) \\ \langle u_1 | \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_z \sigma_x | u_2 \rangle &= -\frac{\hbar}{4\sqrt{3}m^2c^2} (\langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_z | Z \rangle - i \langle Y | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_z | Z \rangle) \end{aligned}$$

Mô hình k.p 6 dải (mô hình Luttinger-Kohn)

Người ta thông số hóa các yếu tố ma trận cơ bản dựa vào tính chất đối xứng của các hàm riêng mô men xung lượng và đối xứng của tinh thể. Cụ thể, với các bán dẫn cấu trúc diamond (có nhóm điểm là O_h), tất cả các yếu tố ma trận bất khả quy của xung lượng bằng không, chỉ một số các yếu tố ma trận bất khả quy của SOI khác không, được định nghĩa như

$$\frac{\hbar}{4m^2c^2} \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Z \rangle = \frac{i}{3} \Delta$$

Như vậy ma trận Hamiltonian k.p (11) có dạng như sau

$$H^{\text{VB}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \Delta \end{bmatrix} \quad (26)$$

Tương tác spin-orbit gây tách suy biến giữa các dải lỗ trống nặng (HH), lỗ trống nhẹ (LH) (có $j = 3/2$) và dải spin-orbit split off (SO) (có $j = 1/2$).

Mô hình k.p 6 dải (mô hình Luttinger-Kohn)

Hệ cơ sở gồm 6 hàm sóng p -like chưa đầy đủ, ta cần tính đến bổ chính do tương tác với các dải ở xa (remote bands). Áp dụng phương pháp phân vùng Löwdin tính đến bậc hai nhiễu loạn, ta được ma trận Hamiltonian rút gọn cho dải hóa trị

$$H^{\text{LK}}(\mathbf{k}) = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^+ & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^+ & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q & -\sqrt{2}R^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (27)$$

trong đó

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad Q = \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2),$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\sqrt{3} \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + i 2 \sqrt{3} \gamma_3 k_x k_y \right), \quad S = \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m} \sqrt{3} (k_x - i k_y) k_z$$

Mô hình k.p 6 dải (mô hình Luttinger-Kohn)

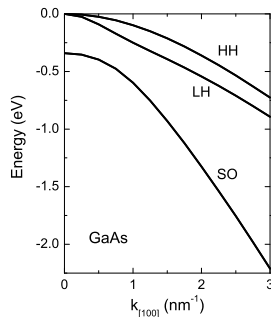
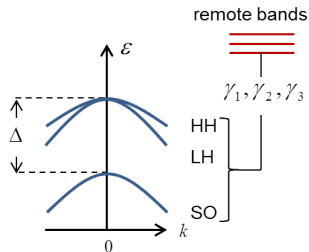
Các thông số Luttinger được định nghĩa bởi

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= -1 + \frac{2}{3m} \sum_{\beta} \frac{p_{X\beta}^x p_{\beta X}^x}{\varepsilon_{\beta}^0} + \frac{4}{3m} \sum_{\beta} \frac{p_{X\beta}^y p_{\beta X}^y}{\varepsilon_{\beta}^0} \\ \gamma_2 &= \frac{1}{3m} \sum_{\beta} \frac{p_{X\beta}^x p_{\beta X}^x}{\varepsilon_{\beta}^0} - \frac{1}{3m} \sum_{\beta} \frac{p_{X\beta}^y p_{\beta X}^y}{\varepsilon_{\beta}^0} \\ \gamma_3 &= \frac{1}{3m} \sum_{\beta} \frac{p_{X\beta}^x p_{\beta Y}^y + p_{X\beta}^y p_{\beta X}^x}{\varepsilon_{\beta}^0}\end{aligned}\quad (28)$$

Nếu bỏ qua tương tác với các dải xa, tức là $\gamma_1 = -1$, $\gamma_2 = \gamma_3 = 0$, Hamiltonian (27) trở về (26).

Bảng thông số cho một số vật liệu

	Si	Ge	GaAs	AlAs
γ_1	4.285	13.38	6.85	3.25
γ_2	0.339	4.24	2.1	0.65
γ_3	1.446	5.69	2.9	1.21
Δ	0.044	0.296	0.341	0.3



Mô hình k.p 8 dải (mô hình Kane)

Mô hình Kane có 8 hàm cơ sở, bao gồm 2 hàm cơ sở s^* -like và 6 hàm cơ sở p -like:

$$|u_1\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} |S\rangle \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$|u_5\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 2|Z\rangle \end{bmatrix}$$

$$|u_2\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ |S\rangle \end{bmatrix}$$

$$|u_6\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ |X\rangle - i|Y\rangle \end{bmatrix}$$

$$|u_3\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$|u_7\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix}$$

$$|u_4\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2|Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix}$$

$$|u_8\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |X\rangle - i|Y\rangle \\ -|Z\rangle \end{bmatrix}$$

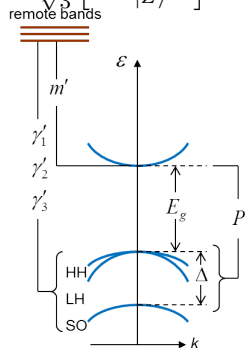
Trạng thái phản liên kết $|S\rangle$ là hàm lẻ và các trạng thái liên kết $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ là các hàm chẵn.

Với các tính thể thuộc nhóm điểm O_h , các yếu tố ma trận bất khả quy khác không của xung lượng và SOI được thông số hóa như sau

$$\frac{\hbar}{m} \langle S | p_x | X \rangle = P$$

$$\frac{\hbar}{4m^2 c^2} \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Z \rangle = \frac{i}{3} \Delta$$

Tập hợp 8 hàm cơ sở trên không đầy đủ và cần phải tính đến đóng góp nhiễu loạn từ các dải xa. Từ đây ta có các thông số sửa đổi m' , γ'_1 , γ'_2 , γ'_3 .



Mô hình k.p 8 dải (mô hình Kane)

Kết quả là ma trận Hamiltonian k.p của mô hình Kane có dạng:

$$H^K(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m'} + E_g & 0 & -\frac{Pk_+}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{2}Pk_z}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_-}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{Pk_z}{\sqrt{3}} & -\frac{Pk_-}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m'} + E_g & 0 & -\frac{Pk_+}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}Pk_z}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_-}{\sqrt{2}} & -\frac{Pk_z}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_-}{\sqrt{3}} \\ -\frac{Pk_-}{\sqrt{2}} & 0 & -A - B & D & -C & 0 & \frac{D}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}C \\ \frac{\sqrt{2}Pk_z}{\sqrt{3}} & -\frac{Pk_-}{\sqrt{6}} & D^+ & -A + B & 0 & -C & \sqrt{2}B & -\frac{\sqrt{3}D}{\sqrt{2}} \\ \frac{Pk_+}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}Pk_z}{\sqrt{3}} & -C^+ & 0 & -A + B & -D & -\frac{\sqrt{3}D^+}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}B \\ 0 & \sqrt{Pk_+}\sqrt{2} & 0 & -C^+ & -D^+ & -A - B & \sqrt{2}C^+ & \frac{D^+}{\sqrt{2}} \\ -\frac{Pk_z}{\sqrt{3}} & -\frac{Pk_-}{\sqrt{3}} & \frac{D^+}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}B^+ & -\frac{\sqrt{3}D}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}C & -A - \Delta & 0 \\ -\frac{Pk_+}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_z}{\sqrt{3}} & \sqrt{2}C^+ & \frac{\sqrt{3}D^+}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}B^+ & -\frac{D}{\sqrt{2}} & 0 & -A - \Delta \end{bmatrix}$$

trong đó

(29)

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y, \quad A = \frac{\hbar^2 \gamma'_1}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad B = \frac{\hbar^2 \gamma'_2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$C = \frac{\hbar^2}{2m} (-\sqrt{3}\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\gamma'_3 k_x k_y), \quad D = \frac{\hbar^2 \gamma'_3}{2m} \sqrt{3}(k_x - ik_y)k_z,$$

$$\frac{m}{m'} = \frac{m}{m^*} - \frac{2m}{3\hbar^2} \left(\frac{2P^2}{E_g} + \frac{P^2}{E_g + \Delta} \right), \quad (30)$$

$$\gamma'_1 = \gamma_1 - \frac{2m}{3\hbar^2} \frac{P^2}{E_g}, \quad \gamma'_2 = \gamma_2 - \frac{m}{3\hbar^2} \frac{P^2}{E_g}, \quad \gamma'_3 = \gamma_3 - \frac{m}{3\hbar^2} \frac{P^2}{E_g}. \quad (31)$$

Mô hình k.p 14 dải (mô hình Kane mở rộng)

Mô hình Kane mở rộng có 14 hàm cơ sở, bao gồm 6 hàm cơ sở p^* -like, 2 hàm cơ sở s^* -like và 6 hàm cơ sở p -like:

$$\begin{aligned}
 |u_1\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\right\rangle_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |X'\rangle - i|Y'\rangle \\ 0 \end{bmatrix} & |u_8\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_c = \begin{bmatrix} 0 \\ |S\rangle \end{bmatrix} \\
 |u_2\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2|Z'\rangle \\ |X'\rangle + i|Y'\rangle \end{bmatrix} & |u_9\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\right\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 0 \end{bmatrix} \\
 |u_3\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_{c'} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} |X'\rangle + i|Y'\rangle \\ 2|Z'\rangle \end{bmatrix} & |u_{10}\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2|Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix} \\
 |u_4\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle_{c'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ |X'\rangle - i|Y'\rangle \end{bmatrix} & |u_{11}\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 2|Z\rangle \end{bmatrix} \\
 |u_5\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |Z'\rangle \\ |X'\rangle + i|Y'\rangle \end{bmatrix} & |u_{12}\rangle &\equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ |X\rangle - i|Y\rangle \end{bmatrix} \\
 |u_6\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |X'\rangle - i|Y'\rangle \\ -|Z'\rangle \end{bmatrix} & |u_{13}\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix} \\
 |u_7\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle_c = \begin{bmatrix} |S\rangle \\ 0 \end{bmatrix} & |u_{14}\rangle &\equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} |X\rangle - i|Y\rangle \\ -|Z\rangle \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Các trạng thái phản liên kết $|S\rangle, |X'\rangle, |Y'\rangle, |Z'\rangle$ là các hàm lẻ.

Các trạng thái liên kết $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ là các hàm chẵn.

Mô hình k.p 14 dải (mô hình Kane mở rộng)

Với các tinh thể thuộc nhóm điểm O_h (Si, Ge), các yếu tố ma trận bất khả quy khác không là

$$\frac{\hbar}{m} \langle S | p_x | X \rangle = P$$

$$\frac{\hbar}{m} \langle X | p_y | Z' \rangle = Q$$

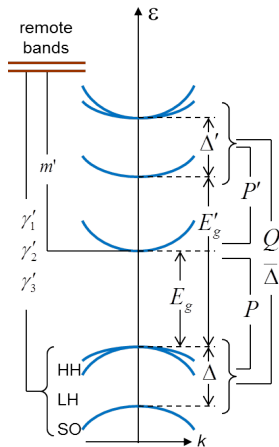
$$\frac{\hbar}{4m^2c^2} \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Z \rangle \equiv \frac{i}{3} \Delta$$

$$\frac{\hbar}{4m^2c^2} \langle X' | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Z' \rangle = \frac{i}{3} \Delta'$$

Với các tinh thể thuộc nhóm điểm T_d (GaAs, ZnSe), do không có đối xứng nghịch đảo người ta có thêm các yếu tố ma trận sau

$$\frac{\hbar}{m} \langle S | p_x | X' \rangle = iP'$$

$$\frac{\hbar}{4m^2c^2} \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Z' \rangle = -\frac{1}{3} \bar{\Delta}$$



Mô hình k.p 14 dải cũng cần đến bổ chính nhiễu loạn từ các dải xa, được thông số hóa bởi m' , γ'_1 , γ'_2 , γ'_3 .

Mô hình k.p 14 dải (mô hình Kane mở rộng)

Dạng tường minh của Hamiltonian k.p của mô hình Kane mở rộng là

$$H^{EK} = \begin{bmatrix} E'_g + \Delta' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{iP'k_-}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i\bar{\Delta}}{3} & \frac{iQk_+}{\sqrt{3}} & \frac{iQk_-}{\sqrt{3}} & 0 & -\frac{iQk_-}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}iQk_z}{\sqrt{3}} \\ & E'_g + \Delta' & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}iP'k_z}{\sqrt{3}} & \frac{iP'k_-}{\sqrt{6}} & -\frac{iQk_-}{\sqrt{3}} & \frac{i\bar{\Delta}}{3} & 0 & \frac{iQk_z}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{iQk_+}{\sqrt{2}} \\ & & E'_g + \Delta' & 0 & 0 & 0 & -\frac{iP'k_+}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}iP'k_z}{\sqrt{3}} & -\frac{iQk_z}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{i\bar{\Delta}}{3} & -\frac{iQk_+}{\sqrt{3}} & -\frac{iQk_-}{\sqrt{2}} & 0 \\ & & & E'_g + \Delta' & 0 & 0 & 0 & -\frac{iP'k_z}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{iQk_z}{\sqrt{3}} & \frac{iQk_-}{\sqrt{3}} & \frac{i\bar{\Delta}}{3} & -\frac{\sqrt{2}iQk_z}{\sqrt{3}} & \frac{iQk_-}{\sqrt{6}} \\ & & & & E'_g & 0 & \frac{iP'k_z}{\sqrt{3}} & \frac{iP'k_-}{\sqrt{3}} & \frac{iQk_-}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{iQk_z}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{2}iQk_+}{\sqrt{3}} & -\frac{2i\bar{\Delta}}{3} & 0 \\ & & & & & E'_g & \frac{iP'k_+}{\sqrt{3}} & -\frac{iP'k_z}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}iQk_z}{\sqrt{3}} & -\frac{iQk_-}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{iQk_+}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{2i\bar{\Delta}}{3} \\ & & & & & & E'_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'} & 0 & -\frac{Pk_+}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{2}Pk_z}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_-}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{Pk_z}{\sqrt{3}} & -\frac{Pk_-}{\sqrt{3}} \\ & & & & & & & E'_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'} & 0 & -\frac{Pk_z}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}Pk_z}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_-}{\sqrt{2}} & -\frac{Pk_-}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_z}{\sqrt{3}} \\ & & & & & & & & -A-B & D & -C & 0 & \frac{D}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}C \\ & & & & & & & & & -A+B & 0 & -C & \sqrt{2}B & -\frac{\sqrt{3}D}{\sqrt{2}} \\ & & & & & & & & & & -A+B & -D & -\frac{\sqrt{3}D^+}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}B \\ & & & & & & & & & & & -A-B & \sqrt{2}C^+ & \frac{D^+}{\sqrt{2}} \\ & & & & & & & & & & & & -A-\Delta & 0 \\ & & & & & & & & & & & & & -A-\Delta \end{bmatrix}$$

Mô hình k.p 14 dải (mô hình Kane mở rộng)

Trong đó

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y$$

$$A = \frac{\hbar^2 \gamma'_1}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad B = \frac{\hbar^2 \gamma'_2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$C = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\sqrt{3} \gamma'_2 (k_x^2 - k_y^2) + i 2 \sqrt{3} \gamma'_3 k_x k_y \right), \quad D = \frac{\hbar^2 \gamma'_3}{2m} \sqrt{3} (k_x - ik_y) k_z$$

Hệ thức giữa khối lượng điện tử hiệu dụng sửa đổi và khối lượng điện tử hiệu dụng:

$$\frac{m}{m'} = \frac{m}{m^*} - \frac{2m}{3\hbar^2} \left[\left(\frac{2P^2}{E_g} + \frac{P^2}{E_g + \Delta} \right) + \left(\frac{P'^2}{E_g - E'_g} + \frac{2P'^2}{E_g - E'_g - \Delta'} \right) \right] \quad (32)$$

Hệ thức giữa thông số Luttinger sửa đổi và thông số Luttinger:

$$\gamma'_1 = \gamma_1 - \frac{2m}{3\hbar^2} \left(\frac{P^2}{E_g} + \frac{Q^2}{E'_g} + \frac{Q^2}{E'_g + \Delta'} \right) \quad (33)$$

$$\gamma'_2 = \gamma_2 - \frac{m}{3\hbar^2} \left(\frac{P^2}{E_g} - \frac{Q^2}{E'_g} \right) \quad (34)$$

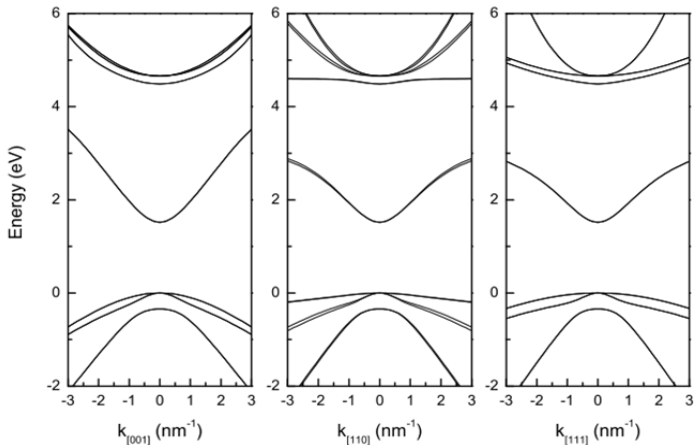
$$\gamma'_3 = \gamma_3 - \frac{m}{3\hbar^2} \left(\frac{P^2}{E_g} + \frac{Q^2}{E'_g} \right) \quad (35)$$

Mô hình k.p 14 dải (mô hình Kane mở rộng)

Bảng thông số cho một số vật liệu

	E_g	E'_g	Δ	Δ'	$\bar{\Delta}$	P	P'	Q	m^*/m	γ_1	γ_2	γ_3
GaAs	1.52	4.49	0.34	0.17	-0.05	1.05	0.5	0.82	0.067	6.85	2.1	2.9
AlAs	3.13	4.54	0.3	0.15		0.897	0.478	0.817	0.15	3.25	0.65	1.21

$E_g, E'_g, \Delta, \Delta', \bar{\Delta}$ có thứ nguyên [eV], P, P', Q có thứ nguyên [eV.nm]



Cấu trúc dải năng lượng của GaAs quanh điểm Γ

Mô hình k.p 30 dải

Mô hình k.p 30 dải có 30 hàm cơ sở, bao gồm 10 hàm d^* -like, 6 hàm p^* -like, 6 hàm s^* -like, 6 hàm p -like và 2 hàm s -like. Tập hợp cơ sở này được xem là đầy đủ, vì thế không cần đến các dải xa và gần đúng nhiễu loạn.

Với tinh thể thuộc nhóm điểm O_h , các yếu tố ma trận bất khả quy khác không của xung lượng và SOI được thông số hóa bởi:

$$P = \langle S | p_x | iX \rangle, \quad P_d = \langle S | p_x | iX_d \rangle,$$

$$P_X = \langle X_G | p_y | iX_d \rangle, \quad P_{X_d} = \langle X_G | p_y | iZ_d \rangle,$$

$$P_3 = \langle D_1 | p_x | iX \rangle, \quad P_{3d} = \langle D_1 | p_x | iX_d \rangle,$$

$$P_2 = \langle S_2 | p_x | iX \rangle, \quad P_{2d} = \langle S_2 | p_x | iX_d \rangle,$$

$$P_S = \langle S_v | p_x | iX_c \rangle, \quad P_U = \langle S_U | p_x | iX_C \rangle,$$

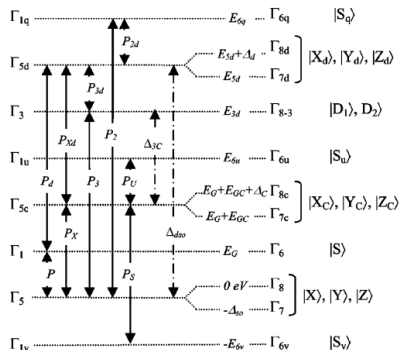
$$\Delta_{so} = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | iZ \rangle,$$

$$\Delta_C = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle X_C | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | iZ_C \rangle,$$

$$\Delta_d = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle X_d | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | iZ_d \rangle,$$

$$\Delta_{dso} = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle X_d | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | iZ \rangle,$$

$$\Delta_{3C} = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle D_1 | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_x | iX_C \rangle$$



[S. Richard et al., Phys. Rev. B70, 235204 (2004)]

Mô hình k.p 30 dải

Với tinh thể thuộc nhóm điểm T_d , do không có đối xứng nghịch đảo người ta có thêm các yếu tố ma trận khác không của xung lượng và SOI như sau:

$$P' = \langle S | p_x | iX_C \rangle, \quad P'_d = \langle X_d | p_y | iZ_d \rangle,$$

$$P'_3 = \langle D_1 | p_x | iX_C \rangle, \quad P'_2 = \langle S_2 | p_x | iX_C \rangle,$$

$$P'_S = \langle S_v | p_x | iX \rangle, \quad P'_{Sd} = \langle S_v | p_x | iX_d \rangle,$$

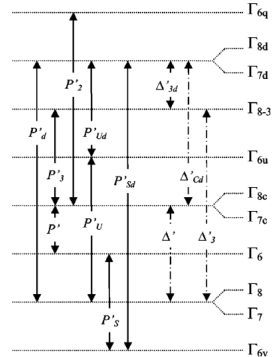
$$P'_U = \langle S_U | p_x | iX \rangle, \quad P'_{Ud} = \langle S_U | p_x | iX_d \rangle,$$

$$\Delta' = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle X_C | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | iZ \rangle,$$

$$\Delta'_{Cd} = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle X_d | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | iZ_C \rangle,$$

$$\Delta'_3 = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle D_1 | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_x | iX \rangle,$$

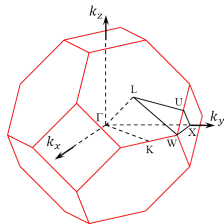
$$\Delta'_{3d} = \frac{3\hbar}{4m^2c^2} \langle D_1 | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_x | iX_d \rangle$$



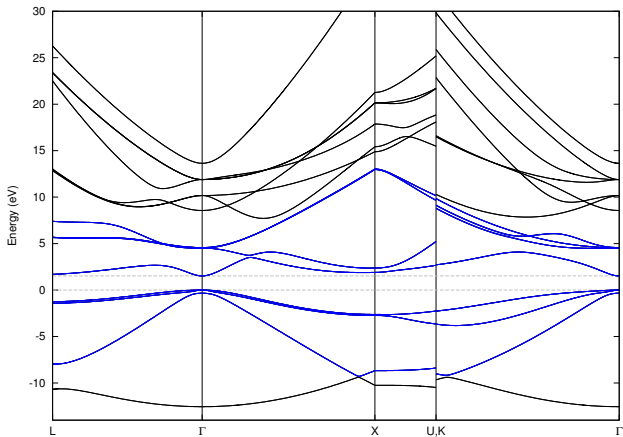
[S. Richard et al., Phys. Rev. B70, 235204 (2004)]

Thay các yếu tố ma trận của xung lượng và SOI vào (11) ta nhận được dạng tường minh của ma trận Hamiltonian 30×30 . Chéo hóa ma trận này tại mỗi điểm \mathbf{k} ta nhận được năng lượng và hàm sóng điện tử.

Mô hình k.p 30 dải



BZ của mạng fcc



Cấu trúc dải của GaAs tính bởi mô hình k.p 30 dải

Lưu ý: Năng lượng và hàm sóng nhận được từ lý thuyết k.p không tự động tuần hoàn trong không gian k .