Scientific-technical journal

Volume 24 | Issue 3 Article 3

6-30-2020

ON THE THEORY OF THE EFFECTIVE HAMILTONIAN OF CURRENT CARRIERS IN A SEMICONDUCTOR

R. Ya. Rasulov
Fergana State University, author@ferpi.uz

B. B. Akhmedov
Fergana State University, author@ferpi.uz

U. Raimimonova
Fergana State University, author@ferpi.uz

A. Abdukholikov
Fergana State University, author@ferpi.uz

Recommended Citation

Rasulov, R. Ya.; Akhmedov, B. B.; Raimimonova, U.; and Abdukholikov, A. (2020) "ON THE THEORY OF THE EFFECTIVE HAMILTONIAN OF CURRENT CARRIERS IN A SEMICONDUCTOR," *Scientific-technical journal*: Vol. 24 : Iss. 3 , Article 3.
Available at: https://uzjournals.edu.uz/ferpi/vol24/iss3/3

ON THE THEORY OF THE EFFECTIVE HAMILTONIAN OF CURRENT CARRIERS IN A SEMICONDUCTOR

Rasulov R.Ya., Akhmedov B.B., Raimimonova U., Abdukholikov A.

Fergana State University

К ТЕОРИИ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Расулов Р.Я., Ахмедов Б.Б., Райимжонова У., Абдухоликов А.

Ферганский государственный университет

ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАРДА ТОК ТАШУВЧИЛАР ЭФФЕКТИВ ГАМИЛЬТОНИАНИ НАЗАРИЯСИ

Расулов Р.Я., Ахмедов Б.Б., Райимжонова У., Абдухоликов А.

Фарғона давлат университети

Abstract. *The matrix elements of the effective carrier Hamiltonian are calculated as in the Kane approximation, where the conduction band, the valence band consisting of light and heavy hole subbands, and the spin-split band, as well as in the Luttinger-Kohn model, are considered.*
Keywords*:* matrix element, effective Hamiltonian, current carriers, wave function.

Аннотация. *Анализированы матричные элементы эффективного гамильтониана носителей тока как в приближении Кейна, где рассматриваются зона проводимости, валентная зона, состоящая из подзон легких и тяжелых дырок и спин- отщепленная зона, а также и в модели Латтинжера-Кона.*
Ключевые слова*:* матричный элемент, эффективный гамильтониан, носители тока, волновая функция.

Аннотация. *Яримўтказгич ўтказувчанлик, валент ва спин орбитал зоналарни ўз ичига олган Кейн модели ҳамда Латтинжер-Кон яқинлашишларида ток ташувчилар эффектив гамильтонианининг матрицавйи элементлари таҳлил қилинган.*
Калит сўзлар сўзлар*:* матрицавий элемент, эффектив гамильтониан, ток ташувчилар, тўлқин функция.

Известно, что многие физические параметры кристаллического потенциал зависят от зонной структуры полупроводника [1-7]. При этом, обычно, в зонной теории считают, что кристаллический периодический потенциал всегда является четной функцией координат. Однако, в отдельных случаях, например, в полупроводнике, где имеется гетеропереход, периодический потенциал кристалла наряду с симметричной части, может иметь и асимметричной части. Этот случай требует отдельного анализа матричных элементов эффективного гамильтониана носителей тока как в приближении Кейна, где рассматриваются зона проводимости, валентная зона, состоящая из подзон легких и тяжелых дырок и спин-отщепленная зона, а также и в модели Латтинжера-Кона [8, 9]. Далее рассмотрим случай, когда экстремальные точки зон находятся в центре зоны Бриллюэна, т.е. в точке $\vec{k}=0$, где $\vec{k}$ волновой вектор носителей тока. В этом случае эффективный гамильтониан можно представить в виде

$$H = H_0 + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \quad (1)$$

и соответствующее (1) уравнение Шредингера имеет

$$\{H_0 + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma}\}\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2)$$

где $H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(r)$ состоит из операторов кинетической и потенциальной энергий, второй член в (1) представляет собой оператора спин-орбитального взаимодействия, $\vec{\sigma}$ - вектор спиновых матриц Паули с компонентами:

$$\sigma_x = \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Bmatrix} \sigma_y = \begin{Bmatrix} 0 & -i \\ 0 & i \end{Bmatrix} \sigma_z = \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix} \quad (3)$$

откуда для спиноров $\uparrow \equiv \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$ $\downarrow \equiv \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}$ имеем следующие соотношения

$$\sigma_x \uparrow = \downarrow \ \sigma_y \uparrow = i \downarrow \ \sigma_z \uparrow = \uparrow \quad \sigma_x \downarrow = \uparrow \ \sigma_y \downarrow = -i \uparrow \ \sigma_z \downarrow = -\downarrow \quad (4)$$

Если решение (3) ищем в виде функции Блоха $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{n\vec{k}}(\vec{r})$, тогда получим уравнение для Блоховской амплитуды $u_{n\vec{k}}(r)$ в виде

$$\{H_0 + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma}\}u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E' u_{n\vec{k}}(r) \quad (5)$$

где $E' = E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$. Последний член в (5) описывает спин-орбитального взаимодействия, зависящего от волнового вектора носителей тока. Таким образом, эффективный гамильтониан, действующий на периодическую функцию $u_{n\vec{k}}(r)$, выражается в виде:

$$H = H_0 + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \quad (6)$$

Здесь $H_1 = \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p}$ и $H_2 = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma}$ появляются из-за перехода от Блоховской функции к функции $u_{n\vec{k}}(r)$, $H_3 = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma}$ слагаемое описывают зависимого спин-орбитального взаимодействия. Блоховская амплитуда $u_{n\vec{k}}(r)$ для электронов в зоне проводимости можно представить как: $|iS\uparrow\rangle$, $|iS\downarrow\rangle$, а для дырок в валентной зоне-$|X\uparrow\rangle$, $|X\downarrow\rangle$, $|Y\uparrow\rangle$, $|Y\downarrow\rangle$, $|Z\uparrow\rangle$, $|Z\downarrow\rangle$ с соответствующими собственными энергиями E_s и E_p, которые определены как $H_0|S\rangle = E_c|S\rangle$, $H_0|X\rangle = E_p|X\rangle$, $H_0|Y\rangle = E_p|Y\rangle$, $H_0|Z\rangle = E_p|Z\rangle$, где [10]

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \ |Z\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}, \ |X \pm iY\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x \pm iy}{r}, \quad (7)$$

где считали, что волновая функция электронов в зоне проводимости является волновой функцией s- состояния, а для валентной зоны- p- состояния атома водорода. Поскольку состояния в зоне проводимости двухкратно вырождены по спину, а в валентной зоне четырехкратно вырождены, поэтому базисные функции представим, как:

$$|1\rangle = |iS\downarrow\rangle, |2\rangle = |\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\uparrow\rangle, |3\rangle = |Z\downarrow\rangle, |4\rangle = |-\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\uparrow\rangle, \quad (8)$$

$$|\bar{1}\rangle = |iS\uparrow\rangle, |\bar{2}\rangle = |-\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\downarrow\rangle, = |Z\uparrow\rangle, = |\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\downarrow\rangle. \quad (9)$$

Сначала определим диагональные матричные элементы гамильтониана (6) по базисным функциям (8) и (9). Это требует рассчитать матричные элементы каждого слагаемого (6) по отдельности, где в дальнейших расчетах учтем, что $\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{x^{2m+1}\cdot y^l \cdot z^\mu}{r^n}d\vec{r} = \iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{x^m \cdot y^{2l+1}\cdot z^\mu}{r^n}d\vec{r} = \iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{x^m \cdot y^l \cdot z^{2\mu+1}}{r^n}d\vec{r} = 0$, где $d\vec{r} = dxdydz$, m, l, μ - целые числа. Тогда матричные элементы операторов

$$H_1 = \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p}, H_2 = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma}, H_3 = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \quad (10)$$

определяются со следующими соотношениями:

$$(H_0)_{11} = \langle 1|H_0|1\rangle = \langle -iS\downarrow|H_0|iS\downarrow\rangle = \langle S|E_s|S\rangle = E_s, \quad (11)$$

$$(H_1)_{11} = \langle 1|H_1|1\rangle = \langle -iS\downarrow|H_1|iS\downarrow\rangle = \langle S|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p}|S\rangle = 0, \quad (12)$$

$$(H_2)_{11} = \langle 1|H_2|1\rangle = \langle -iS\downarrow|H_2|iS\downarrow\rangle =$$
$$= \langle -iS\downarrow|\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\left[\vec{\nabla}V\times\vec{k}\right]\cdot\vec{\sigma}|iS\downarrow\rangle = -\frac{\hbar^2}{16\pi m_0^2c^2}\mathcal{J}_1 \quad (13)$$

где

$$\mathcal{J}_1 = \iiint_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\partial V}{\partial x}k_y - \frac{\partial V}{\partial y}k_x\right\}dxdydz \quad (14)$$

и учтены, что $\vec{p}|S\rangle = 0$ (поскольку функция S постоянная величина), а также условия ортонормированности спиноров

$$\sigma_x\uparrow=\downarrow, \sigma_y\uparrow= i\downarrow, \sigma_z\uparrow=\uparrow, \sigma_x\downarrow=\uparrow, \sigma_y\downarrow= -i\uparrow, \sigma_z\downarrow= -\downarrow. \quad (15)$$

Если считаем, что кристаллический периодический потенциал состоит из двух: четных и нечетных относительно к инверсии координат слагаемых: $V(\vec{r}) = V_{ass}(\vec{r}) + V_{sim}(\vec{r})$, где $V_{sim}(\vec{r})V(\vec{r}) = (\overline{-\vec{r}})$, $V_{ass}(\vec{r}) = -V_{ass}(-\vec{r})$, $V_{ass}(\vec{r})$, тогда нетрудно убедиться в том, что интеграл $\mathcal{J}_1$ будет иметь отличные нуля слагаемые. Поэтому проанализируем следующие случаиИз (14) видно, что: а) если $V(\vec{r})$ имеет нечетное слагаемое относительно *z*, тогда $\mathcal{J}_1 = 0$; б) если $V(\vec{r})$ имеет нечетное слагаемое относительно *x*, тогда $\mathcal{J}_{11} = \iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial V_{ass}(\vec{r})}{\partial x}k_y\,dxdydz \neq 0$; с) если $V(\vec{r})$ имеет нечетное слагаемое относительно *y*, тогда $\mathcal{J}_{12} = -\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial V_{ass}(\vec{r})}{\partial y}k_x\,dxdydz \neq 0$; д) если $V(\vec{r})$ имеет нечетное слагаемое относительно *x* и *y*, тогда $\mathcal{J}_1 = \iiint_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\partial V_{ass}(\vec{r})}{\partial x}k_y - \frac{\partial V_{ass}(\vec{r})}{\partial y}k_x\right\}dxdydz \neq 0$

$$(H_3)_{11} = \langle -iS\downarrow|H_3|iS\downarrow\rangle = \langle -iS\downarrow|\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V\times\vec{p}]\cdot\vec{\sigma}|iS\downarrow\rangle =$$
$$= -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\langle S\left|\left[\vec{\nabla}V\times\vec{p}\right]_z\right|S\rangle = 0 \quad (16)$$

Диагональные матричные элементы эффективного гамильтониана определяется следующими выражениями:

$$(H_0)_{22} = \{\frac{X+iY}{\sqrt{2}}|H_0|\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\} = E_p\,, \quad (17)$$

$$(H_1)_{22} = \langle\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\uparrow|H_1|\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\uparrow\rangle = \mathcal{J}_{22}^{(1)} + \mathcal{J}_{22}^{(2)} + \mathcal{J}_{22}^{(3)} + \mathcal{J}_{22}^{(4)}.$$

где

$$\mathcal{J}_{22}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{1}{i}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{x^2yk_y + (xy^2+xz^2)k_X\right\}dxdydz,$$
$$\mathcal{J}_{22}^{(2)} = +\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{1}{i}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{(yx^2+yz^2)k_y + xy^2k_X\right\}dxdydz,$$
$$\mathcal{J}_{22}^{(3)} = -\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{(x^3+xz^2)k_y + x^2yk_X\right\}dxdydz,$$
$$\mathcal{J}_{22}^{(4)} = -\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{1}{i}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{xy^2k_y + (y^3+yz^2)k_X\right\}dxdydz,$$

откуда видно, что: a) $\mathcal{J}_{22}^{(1)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$; b) $\mathcal{J}_{22}^{(2)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$; c) $\mathcal{J}_{22}^{(3)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$; d) $\mathcal{J}_{22}^{(4)}$состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$.

$$(H_2)_{22} = \langle\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\uparrow|H_2|\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\uparrow\rangle == \mathcal{R}_{22}^{(1)} + \mathcal{R}_{22}^{(2)} + \mathcal{R}_{22}^{(3)} + \mathcal{R}_{22}^{(4)}, \quad (18)$$

где

$$\mathcal{R}_{22}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^2}\left\{x^2\frac{\partial V}{\partial x}k_y - x^2\frac{\partial V}{\partial y}k_x\right\}dxdydz,$$

$$\mathcal{R}_{22}^{(2)} = \frac{(-i)\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^2}\left\{xy\frac{\partial V}{\partial x}k_y - xy\frac{\partial V}{\partial y}k_x\right\}dxdydz,$$

$$\mathcal{R}_{22}^{(3)} = \frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^2}\left\{xy\frac{\partial V}{\partial x}k_y - xy\frac{\partial V}{\partial y}k_x\right\}dxdydz,$$

$$\mathcal{R}_{22}^{(4)} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^2}\left\{y^2\frac{\partial V}{\partial x}k_y - y^2\frac{\partial V}{\partial y}k_x\right\}dxdydz.$$

Из последних соотношений видно, что: a) $\mathcal{R}_{22}^{(1)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а третье при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$; b) $\mathcal{R}_{22}^{(2)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а третье при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$; *c)* $\mathcal{R}_{22}^{(3)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе и третье слагаемые отличны от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$; *d)* $\mathcal{R}_{22}^{(4)}$состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$.

$$(H_3)_{22}\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\{\mathfrak{I}_{33}^{(1)} + \mathfrak{I}_{33}^{(2)} + \mathfrak{I}_{33}^{(3)} + \mathfrak{I}_{33}^{(4)}\}$$

$$\mathfrak{I}_{33}^{(1)} = i\frac{3\hbar}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y}zx^2 - \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z}x^2y\right\}dxdydz,$$

$$\mathfrak{I}_{33}^{(2)} = i\frac{3\hbar}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y}y^2z + (yx^2 + yz^2)\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z}\right\}dxdydz,$$

$$\mathfrak{I}_{33}^{(3)} = +\frac{3\hbar}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{xyz\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y} + (x^3 + xz^2)\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z}\right\}dxdydz,$$

$$\mathfrak{I}_{33}^{(4)} = -\frac{3\hbar}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{xyz\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y} - xy^2\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial z}\right\}dxdydz,$$

Анализируя последних соотношений имеем, что: a) $\mathfrak{I}_{33}^{(1)}$ отличен от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$; b) $\mathfrak{I}_{33}^{(2)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а третье при $V(\vec{r}) = V_{\phi sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$; c) $\mathcal{J}_{33}^{(3)}$ состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе и третье слагаемые отличны от нуля при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$; d) $\mathfrak{I}_{33}^{(4)}$состоит из двух слагаемых, первое из которых отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$, а второе отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$.

Ниже приведены выражения для матричного элемента каждого члена гамильтониана. В частности, $(H_0)_{33} = \langle Z\downarrow|H_0|Z\downarrow\rangle = \langle Z|E_p|Z\rangle = E_p$и не зависит от четности кристаллического потенциал относительно координат;

$$(H_1)_{33} = \langle Z\downarrow|H_1|Z\downarrow\rangle = \langle Z\downarrow\left|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p}\right|Z\downarrow\rangle = <\downarrow\downarrow>\langle Z\left|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p}\right|Z\rangle =$$

$$= i\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^2}\left\{k_x(-xz^2) + k_y(-yz^2) + k_z z\frac{y^2 + x^2}{r^3}\right\}dxdydz,$$

откуда имеем, что первое слагаемое последнего интеграла отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе-при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$, третье-при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$.

$$(H_2)_{33} = \langle Z\downarrow|H_1|Z\downarrow\rangle = \langle Z\downarrow\left|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p}\right|Z\downarrow\rangle =<\downarrow\downarrow> \langle Z\left|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p}\right|Z\rangle =$$

$$= i\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^2}\left\{k_x(-xz^2) + k_y(-yz^2) + k_z z\frac{y^2+x^2}{r^3}\right\}dxdydz.$$

Из последних соотношений видно, что первое слагаемое матричного элемента $(H_2)_{33}$ отлично от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{sim}(y) + V_{sim}(z)$, а второе-при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$, третье-при $V(\vec{r}) = V_{sim}(x) + V_{sim}(y) + V_{asim}(z)$.

$$(H_3)_{33} = \langle Z\downarrow|H_3|Z\downarrow\rangle = \langle Z\downarrow|\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}[\vec{\nabla}V\times\vec{p}]\cdot\vec{\sigma}|Z\downarrow>=$$

$= -\frac{i\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{3}{4\pi}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{r^4}\left\{z^2\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial x}y - xz^2\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y}\right\}dxdyd$ и этот матричный элемент отличен от нуля при $V(\vec{r}) = V_{asim}(x) + V_{asim}(y) + V_{sim}(z)$.

Таким образом, показали, что при учете асимметричной части кристаллического потенциала в полупроводниках получаются дополнительные слагаемые в матричных элементах эффективного гамильтониана.

Если считаем, что кристаллический потенциал не имеет асимметричной части, тогда все выражения, полученные выше и связанные с $V_{asim}(x,y,z)$, обращаются в ноль автоматически.

References:

[1]. Charles Kittel. Introduction to Solid State Physics. John Wiley and Sons, Inc. All. Rights reserved. -2005. -675 p.
[2]. J. M. Ziman. Principles of the Theory of Solids. Cambridge University Press, 1972 - 435 p.
[3]. Mohammad Abdul Wahab Solid State Physics: Structure and Properties of Materials Alpha Science International, -2005. -596 p. 1842652184, 9781842652183
[4]. Neil W. Ashcroft, Mermin Ashcroft, Dan Wei, N. David Mermin. Solid State Physic. CENGAGE Learning Asia, -2016 g. – 1332 p.
[5]. Kardona Yu Piter, Kardona Manuel. Osnovi fiziki poluprovodnikov. Per. s angl. I. I. Reshinoy. Pod red. B. P. Zaxarcheni. — 3-e izd., ispr. i dop. -M.: Fizmatlit, -2002. -560 s. http://www.twirpx.com/file/221809/
[6]. E.L.Ivchenko, R.Ya. Rasulov. O zonnoy strukture i poglosheniya polyarizovannogo izlucheniya v xalkogenidax svintsa. Nauchno-texnicheskiy jurnal FerPI.. 2015. T.19. №4. S. 9-15.
[7]. V.R.Rasulov, R.Ya.Rasulov. Dimensional duantization in GaP. Scientific technical journal of FerPI. 2018. Vol.22. Issue 3. P.15-20.
[8]. Gennadiĭ Levikovich Bir, Grigoriĭ Ezekielevich Pikus. Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors. Wiley, 1974 – 484 p. ISBN 0470073217, 9780470073216
[9]. Ivchenko Ye.L., R.Ya.Rasulov. Simmetriya i realnaya zonnaya struktura poluprovodnikov. -Tashkent. -Fan. -1989. –126 s.
[10]. L D Landau E. M. Lifshitz. Quantum Mechanics. 3rd Edition. Non-Relativistic Theory. Pergamon. -1977. -688 p.

Список литературы

[1]. Charles Kittel. Introduction to Solid State Physics. John Wiley and Sons, Inc. All. Rights reserved. -2005. -675 p.
[2]. J. M. Ziman. Principles of the Theory of Solids. Cambridge University Press, 1972 - 435 p.
[3]. Mohammad Abdul Wahab Solid State Physics: Structure and Properties of Materials Alpha Science International, -2005. -596 p. 1842652184, 9781842652183
[4]. Neil W. Ashcroft, Mermin Ashcroft, Dan Wei, N. David Mermin. Solid State Physic. CENGAGE Learning Asia, -2016 г. – 1332 p.
[5]. Кардона Ю Питер, Кардона Мануэль. Основы физики полупроводников. Пер. с англ. И. И. Решиной. Под ред. Б. П. Захарчени. — 3-е изд., испр. и доп. -М.: Физматлит, -2002. -560 с. http://www.twirpx.com/file/221809/
[6]. Е.Л.Ивченко, Р.Я. Расулов. О зонной структуре и поглощения поляризованного излучения в халькогенидах свинца. Научно-технический журнал ФерПИ.. 2015. Т.19. №4. С. 9-15.
[7]. V.R.Rasulov, R.Ya.Rasulov. Dimensional duantization in GaP. Scientific technical journal of FerPI. 2018. Vol.22. Issue 3. P.15-20.

[8]. Gennadiĭ Levikovich Bir, Grigoriĭ Ezekielevich Pikus. Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors. Wiley, 1974 – 484 p. ISBN 0470073217, 9780470073216

[9]. Ивченко Е.Л., Р.Я.Расулов. Симметрия и реальная зонная структура полупроводников. -Ташкент. -Фан. - 1989. –126 с.

[10]. L D Landau E. M. Lifshitz. Quantum Mechanics. 3rd Edition. Non-Relativistic Theory. Pergamon. -1977. -688 p.