



“十二五”国家重点图书出版规划项目

光物理研究前沿系列

总主编 张杰

国家出版基金项目  
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

# 凝聚态光学

## 研究前沿

陈良尧 等 编著

# *Advances in Condensed Matter Optics*



上海交通大学出版社  
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS



国家出版基金项目  
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

“十二五”国家重点图书出版规划项目

光物理研究前沿系列

总主编 张杰

# 凝聚态光学研究前沿

Advances in Condensed Matter Optics

陈良尧 等 编著



上海交通大学出版社  
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS

## 内容提要

---

本书是“十二五”国家重点图书出版规划项目“光物理研究前沿系列”之一,包括窄禁带半导体的红外光学性质及其应用、特异介质中的群速度图像、光在金属基界面的传播特性研究、自旋电子材料的光动力学研究、低维氧化物结构中的光电物理研究、金属超构材料中光波的磁响应与强耦合效应等前沿专题。

本书可供光学及物理专业的本科生、研究生及相关研究人员阅读参考。

---

## 图书在版编目(CIP)数据

凝聚态光学研究前沿 / 陈良尧等编著. —上海:

上海交通大学出版社, 2014

(光物理研究前沿系列/张杰主编)

ISBN 978-7-313-10686-5

I. ①凝… II. ①陈… III. ①凝聚态—光学—研究  
IV. ①043

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 291932 号

## 凝聚态光学研究前沿

编 著: 陈良尧等

出版发行: 上海交通大学出版社

邮政编码: 200030

出 版 人: 韩建民

印 制: 山东鸿杰印务集团有限公司

开 本: 710 mm × 1000 mm 1/16

字 数: 324 千字

版 次: 2014 年 9 月第 1 版

书 号: ISBN 978-7-313-10686-5/O

定 价: 85.00 元

地 址: 上海市番禺路 951 号

电 话: 021-64071208

经 销: 全国新华书店

印 张: 18.5

印 次: 2014 年 9 月第 1 次印刷

版权所有 侵权必究

告读者: 如发现本书有印装质量问题请与印刷厂质量科联系

联系电话: 0533-8510898

# 光物理研究前沿系列 丛书编委会

总主编

张 杰

(上海交通大学, 院士)

编 委

(按姓氏笔画排序)

- |     |                       |
|-----|-----------------------|
| 刘伍明 | 中国科学院物理研究所, 研究员       |
| 许京军 | 南开大学, 教授              |
| 李儒新 | 中国科学院上海光学精密机械研究所, 研究员 |
| 张卫平 | 华东师范大学, 教授            |
| 陈良尧 | 复旦大学, 教授              |
| 陈险峰 | 上海交通大学, 教授            |
| 陈增兵 | 中国科学技术大学, 教授          |
| 金奎娟 | 中国科学院物理研究所, 研究员       |
| 骆清铭 | 华中科技大学, 教授            |
| 钱列加 | 上海交通大学, 教授            |
| 高克林 | 中国科学院武汉物理与数学研究所, 研究员  |
| 龚旗煌 | 北京大学, 院士              |
| 盛政明 | 上海交通大学, 教授            |
| 程 亚 | 中国科学院上海光学精密机械研究所, 研究员 |
| 童利民 | 浙江大学, 教授              |
| 曾和平 | 华东师范大学, 教授            |
| 曾绍群 | 华中科技大学, 教授            |
| 詹明生 | 中国科学院武汉物理与数学研究所, 研究员  |
| 潘建伟 | 中国科学技术大学, 院士          |
| 戴 宁 | 中国科学院上海技术物理研究所, 研究员   |
| 魏志义 | 中国科学院物理研究所, 研究员       |

# 序

光物理是研究光辐射的基本性质及其与物质相互作用的科学。光与凝聚态物质相互作用是光物理学科的重要研究内容之一。

一般说来,凝聚态光学研究包括两个方面。一方面激光作为一种性能优异的探针,可用于研究凝聚态物质的结构和运动规律。由于激光具有高亮度、窄线宽、宽调谐、高时间分辨、高空间分辨和可实现光束之间精确同步等特性,可以用多种类型的光谱技术、光散射技术和泵浦探测技术等方法研究凝聚态物质,精确地探测凝聚态物质及其激发态结构,有效地研究凝聚态物质的运动和快速变化规律。另一方面,通过凝聚态光学研究可以发现新的物质状态和新的运动规律,这些新发现可用于产生新的光源、新的探测器和多种其他器件。因此,凝聚态光学的研究不仅可以促进凝聚态学科的发展,又可以促进光学学科自身的发展。光物理学科的发展和凝聚态物理学科的发展是交叉融合、相互促进和共同发展的。

本书选择了凝聚态光学快速发展的6个前沿专题。第一专题为窄禁带半导体的红外光学性质及其应用,系统地介绍了窄禁带半导体的能带结构、基本特性和典型的应用;第二专题为特异介质中的群速度图像,介绍了具有超常光学性能的特异介质材料及其特性,重点讨论了负折射率材料、超分辨率成像和隐身的物理图像;第三专题为光在金属基界面的传播特性研究,重点介绍了表面等离子体激元的特性以及它如何对光传播特性进行调控和影响;第四专题为自旋电子材料的光动力学研究,介绍了自旋电子学这一门新兴学科,重点讨论了这类材料在超快激光脉冲作用下呈现的多种自旋动力学过程以及相应的退磁、磁性相变和磁矩反转等现象的物理机制;第五专题为低维氧化物结构中的光电物理研究,介绍了钙钛矿氧化物的制备、结构及其物理性质,重点讨论了这类氧化物异质结的纵向、横向光电效应和钙钛矿氧化物异质结在快速紫外光电探测器方面重要的应用前景;第六专题为金属超构材料中光波的磁响应与强耦合效应,介绍了完全由人工设计的许多性质超出自然材料的超构材料及其光学特性,重点讨论了磁耦合超构材料及其通过磁响应过程实现对光波的调控。

本书介绍了上述领域最新发展的状况,详细讨论了许多重要概念,诸如倏逝波、负折射、超透镜成像、表面等离子体绝缘和超构材料中光波的磁响应等。本书还详细评述了光在窄禁带半导体材料、自旋电子材料和低维氧化物结构中的研究动态,并介绍了这些材料在半导体激光、红外探测器和紫外探测器等领域的重要应用。本书的重要特点是其具有新颖性和前瞻性。

本书作者大多是工作在科研第一线的青年专业人才。他们较全面地掌握了所从事领域的全貌和发展动态,对各分支学科的评述是恰如其分的。另外,本书还包含了他们在各自领域的最新研究成果。

本书可作为相关专业的本科生、研究生和研究人员一本有价值的参考书。

杨国栋

2014年6月

# 目 录

I 窄禁带半导体的红外光学性质及其应用/戴 宁 .....	1
1.1 窄禁带半导体的基本特性概述 .....	4
1.1.1 电子态和基本能带结构 .....	5
1.1.2 结构特性 .....	8
1.1.3 晶体生长 .....	9
1.1.4 电学性质 .....	12
1.1.5 光学性质 .....	15
1.2 窄禁带半导体材料及其基本特性 .....	20
1.2.1 碲镉汞( $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ) .....	20
1.2.2 锑化铟( $\text{InSb}$ )、砷化铟( $\text{InAs}$ )和铟砷锑( $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ ) .....	24
1.2.3 碲化铅( $\text{PbTe}$ )、硒化铅( $\text{PbSe}$ )、硫化铅( $\text{PbS}$ )以及碲锡铅 ( $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ ) .....	26
1.2.4 异质结、量子阱、超晶格 .....	28
1.3 典型的红外光电器件原理及其应用 .....	29
1.3.1 红外探测器基本原理 .....	29
1.3.2 表征红外探测器性能的参数 .....	32
1.3.3 光导型红外探测器 .....	34
1.3.4 光伏型红外探测器 .....	36
1.3.5 量子阱红外探测器 .....	39
1.3.6 红外光源——红外发光器件和红外激光器 .....	40
参考文献 .....	43
2 特异介质中的群速度图像/蒋寻涯 李 伟 刘 征 林旭林 张小刚 梁子贤 姚培军 .....	47
2.1 引言 .....	49
2.2 双曲超界面:传输波与倏逝波之间转换的桥梁 .....	50

2.2.1	研究模型	51
2.2.2	双曲色散关系与双曲界面上的波包压缩效应	52
2.2.3	群速度图像分析双曲界面上光的反常现象	53
2.2.4	动态数值实验及结果讨论	54
2.3	利用倏逝波探测真空极化的方法	56
2.3.1	研究模型	57
2.3.2	弱损耗介质中倏逝波的相位变化和时间延迟	58
2.3.3	强外电场下真空的极化及其折射率变化	59
2.3.4	倏逝波探测真空极化:相位变化和时间延迟	60
2.4	负折射率超透镜成像的时间相干增益	61
2.4.1	研究模型	62
2.4.2	超透镜成像中的非常规时间相干增益	63
2.4.3	物理图像	64
2.4.4	唯象理论	65
2.5	色散隐身衣动态过程的物理图像和关键因素	67
2.5.1	研究模型	68
2.5.2	隐身动态过程的物理图像	69
2.5.3	隐身弛豫时间的关键因素	71
2.6	色散隐身衣的物理极限	73
2.6.1	隐身衣的群速度分布与物理极限	74
2.6.2	数值实验及结果讨论	77
2.7	基于磁畴结构的单向光传输	79
2.7.1	磁畴上光的单向群速度	80
2.7.2	磁畴上光的局域化	81
2.7.3	磁畴上光传播的抗无序	82
2.7.4	基于磁畴结构单向模式的光分束器和偏转器	83
2.8	光子晶体中类似子弹的光脉冲	86
2.8.1	类似光子子弹光脉冲的建立条件	86
2.8.2	在光子晶体中建立类似光子子弹的光脉冲	87
2.8.3	数值实验验证	88
2.8.4	高阶色散的影响	88
2.9	小结	90
	参考文献	91



3	光在金属基界面的传播特性研究/陈良尧 郑玉祥 王松有 .....	99
3.1	引言 .....	101
3.2	金属的自由电子气模型和光学常数 .....	101
3.3	光在金属基界面的折射特性 .....	106
3.3.1	正常折射特性 .....	106
3.3.2	有效折射率和折射角的计算 .....	107
3.3.3	金属基人工材料的负折射特性 .....	109
3.3.4	金属有效折射率和折射角的实验测量 .....	112
3.3.5	受折射率影响的光速可变机理 .....	118
3.4	表面等离子波对光在金属中传输特性的影响 .....	121
3.5	小结 .....	125
	参考文献 .....	126
4	自旋电子材料的光动力学研究/赵海斌 .....	131
4.1	自旋磁矩动力学的理论描述 .....	134
4.1.1	Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)方程 .....	134
4.1.2	Landau-Lifshitz-Bloch (LLB)方程 .....	136
4.2	自旋动力学研究中的光学技术 .....	137
4.2.1	时间分辨磁光光谱 .....	137
4.2.2	时间分辨磁性二次谐波谱 .....	144
4.3	光致退磁及铁磁相变 .....	147
4.3.1	过渡族铁磁金属的超快退磁 .....	147
4.3.2	其他铁磁材料的光致退磁 .....	152
4.3.3	超快磁矩产生及铁磁相变 .....	153
4.4	光致自旋进动 .....	155
4.4.1	铁磁材料的一致自旋进动与自旋波 .....	155
4.4.2	亚(反)铁磁材料的自旋进动 .....	158
4.4.3	自旋进动激发机制 .....	160
4.5	光致自旋反转 .....	168
4.5.1	铁磁材料的自旋转向与反转 .....	168
4.5.2	亚铁磁材料的自旋反转 .....	170
4.6	界面自旋与反铁磁自旋动力学 .....	174
4.6.1	磁性二次谐波与铁磁金属表面和界面磁矩 .....	174

4.6.2 磁性二次谐波与反铁磁自旋动力学·····	176
4.7 总结和展望·····	177
参考文献·····	179
<b>5 低维氧化物结构中的光电物理研究/金奎娟 葛琛 吕惠宾</b>	
杨国桢·····	185
5.1 引言·····	187
5.2 钙钛矿氧化物·····	188
5.2.1 晶体结构·····	189
5.2.2 电子结构·····	189
5.2.3 磁有序和电荷有序·····	190
5.2.4 钙钛矿氧化物块材光电物理·····	192
5.3 钙钛矿氧化物异质结的制备·····	196
5.3.1 氧化物薄膜生长技术简介·····	196
5.3.2 激光分子束外延技术·····	198
5.3.3 反射式高能电子衍射技术·····	200
5.3.4 衬底处理·····	201
5.4 钙钛矿氧化物异质结构纵向光电效应·····	202
5.4.1 光生载流子注入效应·····	202
5.4.2 光生伏特效应·····	204
5.4.3 纵向光电效应理论研究·····	211
5.5 钙钛矿氧化物异质结横向光电效应·····	218
5.5.1 横向光电效应的研究历史·····	218
5.5.2 反常横向光电效应的发现·····	219
5.5.3 横向光电效应的理论研究·····	220
5.6 总结和展望·····	225
参考文献·····	227
<b>6 金属超构材料中光波的磁响应与强耦合效应/刘辉 祝世宁·····</b>	<b>239</b>
6.1 背景介绍·····	241
6.2 磁共振分子·····	244
6.2.1 等离激元耦合效应·····	244
6.2.2 磁共振分子耦合杂化·····	244

6.2.3	立体磁共振超构分子 .....	246
6.2.4	磁共振分子的旋光 .....	247
6.2.5	磁共振分子的辐射特性 .....	248
6.2.6	其他磁共振分子的设计 .....	249
6.3	一维磁振子链 .....	250
6.3.1	周期磁振子链 .....	250
6.3.2	非周期梯度磁振子链 .....	256
6.3.3	磁振子的非线性与量子光学特性 .....	257
6.4	磁等离激元晶体 .....	259
6.4.1	二维金属渔网磁共振结构 .....	259
6.4.2	二维三明治磁共振晶体 .....	263
6.4.3	三维磁等离激元晶体的量子干涉 .....	270
6.5	总结和展望 .....	272
	参考文献 .....	272
	索引 .....	279



# 窄禁带半导体的红外光学性质及其应用

戴 宁



窄禁带半导体是半导体材料的重要分支,一般是指其能隙对应的波长范围在红外波段的半导体。窄禁带半导体的能隙较窄,材料中的本征载流子激发很强,载流子浓度很高,p型和n型掺杂不容易很好控制,这些性质决定了窄禁带半导体的光学性质同宽带隙材料很不相同。

半导体材料所特有的优良光电特性表现在,通过少量掺杂就能大大改变电导率,以及对光波存在同波长有关的光吸收系数,即材料对波长超过带隙的光表现很强的吸收。因此半导体具有很强的光电响应特性,优良的光电特性使半导体材料成为首选的光电探测核心材料。但是,红外波段的光电器件由于材料带隙窄,材料逐渐失去半导体特性而表现得更像金属,导致器件的光电性能变差。具体表现如下:

(1) 窄带隙材料中原子之间键合很弱,材料的缺陷密度增加,晶体完备性变差。

软的材料很难生长,难以获得大面积、大块的单晶,晶体的缺陷和位错密度很高。比如Si单晶的直径可以做到20 in (1 in=2.54 cm)以上,而生长2 in的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 已经很困难了。另外,Si的缺陷密度比 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 低大约1~2个数量级。

(2) 作为半导体最具特点的掺杂可控性减弱,获得性能优异的p型或n型材料变得非常困难。

宽禁带半导体往往表现绝缘体的性能,其特点是难以同时具备p型和n型掺杂特性。比如宽禁带的ZnO(带隙3.4 eV)、ZnSe(带隙2.7 eV)容易掺n型,不容易掺p型,而ZnTe(带隙2.3 eV)容易掺p型,不容易掺n型;带隙在1~2 eV的材料最具半导体特性,比如Si(带隙1.12 eV)和GaAs(带隙1.4 eV)n型和p型掺杂都不难;另一方面,带隙越窄的红外材料越接近金属,比如窄禁带的本征 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 很难生长,一般情况下载流子浓度很高,n型掺杂还相对容易些,p型掺杂就很难,往往得靠缺陷(如Hg空位)实现p型,因此空穴的迁移率以及少子寿命很低。

(3) 材料带隙越窄,带隙同杂质、缺陷、声子等低能激发的能量越接近,低能激发对器件光电过程的影响越显著。

声子的影响可以通过降低器件工作温度来抑制。比如15  $\mu\text{m}$   $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 探测器的工作温度往往在30 K左右,以抑制本征热激发,但这样低的工作温度使得器件使用很不方便。缺陷、杂质类低能激发的影响则无法通过降低温度来消除。

(4) 长波红外范围内部分基本物理过程灵敏地依赖带隙。

以长波  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  材料为例,从 12.5 到 14.5  $\mu\text{m}$  尽管材料的带隙只改变了 15%,但在同样的工作温度下  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  探测器的 p-n 结漏电流则增加 2 个数量级!

上述基本物理问题是导致红外器件,特别是长波红外器件探测率低,器件漏电流大,暗电流大,噪声大,串音现象严重,需要很低工作温度的根本原因。上述因素会严重影响器件性能,甚至使器件无法使用。而空间应用,特别是深空探测对象的目标温度很低,导致目标的辐射能量很低、特征辐射波长很长。这就要求探测器具有很高的灵敏度和很长的截止波长,使获得性能良好探测器的难度大大增加。有关红外材料、器件的专著可参阅参考文献[1-4]。

此外,一般红外焦平面的光敏元尺寸在 20~50  $\mu\text{m}$ ,长波红外探测器探测目标的波长在 15  $\mu\text{m}$  左右或更长,即焦平面光敏元的尺寸与探测波长同数量级。这样,光电耦合的过程很可能存在新的影响因素。光与物质相互作用中的一个重要科学问题是表现为量子力学特征的各种能量的光子同低维结构半导体的相互作用机理,而焦平面光敏元相对长波红外光子是低维结构。这一相互作用涉及光在尺度为亚波长或远小于波长物质中的吸收、反射、透射和能量交换过程。光同物质相互作用涉及光电耦合和光电转换等核心问题,研究相互作用机理的目的在于掌握控制这类相互作用的方法和手段。

窄禁带半导体的研究大约始于 20 世纪 40 年代的 PbS。1952 年发现的 InSb 后来成为典型的窄禁带半导体材料。1959 年起开始研究以 HgTe 和 CdTe 为基的三元合金  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ,随着 Cd 的组分  $x$  从 1 变到 0, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  的能隙从 1.42 连续变到 -0.3 eV,其中当 Hg 的组分为 0.84 时  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  的禁带宽度为零。过去提出并研究的三元混晶窄禁带半导体包括 IV-VI 族的  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$  和  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ ,II-VI 族的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ 、 $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ ,以及 III-V 族的  $\text{In}_{1-x}\text{As}_x\text{Sb}$  和  $\text{InAs}_{1-x-y}\text{N}_x\text{Sb}_y$  等。本专题将从基本原理、实验方法,结合研究现状阐述窄禁带半导体的红外光学性质及其应用。

## 1.1 窄禁带半导体的基本特性概述

决定半导体材料光学、电学特性的最重要参数之一是材料的禁带宽度,而固体材料的禁带宽度变化范围很大,可以从零带隙(甚至负带隙)一直到将近 10 eV。按禁带宽度  $E_g$  大小,一般认为  $E_g$  大于 2.5 eV 的是绝缘体, $E_g$  在 0~2.5 eV 的是半导体, $E_g$  为负的是半金属。金属也有能带,只是电子在导带中处

于未充满状态。窄带隙材料导带与价带靠得很近,相互作用比较大,色散关系(电子能量  $E$  与波矢  $k$  的依赖关系)表现很强的非抛物线特性,在色散关系的极值点附近有效质量不再是常数。有效质量近似地同带隙成正比,因此窄带隙材料的电子有效质量很小,容易表现量子限域效应。窄带隙材料的有效  $g$  因子较大,磁性质比较丰富。 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ,  $\text{InSb}$  等是研究磁量子输运和自旋相关现象的热点材料。比如,  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  零磁场下的 Rashba 自旋-轨道分裂竟达到  $30\text{ meV}^{[5]}$ 。另外,窄带隙半导体的缺陷密度较高,背景杂质浓度高,加上本征激发现象显著,材料中一般载流子浓度比较高,费米能级很容易进入导带。

### 1.1.1 电子态和基本能带结构

描述和计算半导体能带结构的方法很多,包括以自由原子轨道波函数为基的紧束缚法、原胞法、缀加平面波法(augmented plane wave method),以及以自由电子平面波波函数为基的近自由电子近似、正交平面波法、赝势法等。借助高性能的计算机,这些方法能够较精确地给出整个倒空间(波矢空间)的能带分布。在描述电子态的方法中,所谓的包络函数近似(envelope function approximation)是非常有效的。这是一种电子态和空穴态的全方位描述,对一些相对简单的体系往往能给出解析的结果。包络函数近似很适合于人造结构晶体,包括周期和准周期的量子阱、超晶格等,甚至能够处理存在电场、磁场以及应力的情况。最简单的包络函数近似是有效质量近似,其主要思想是将比较复杂的一部分晶体势归入电子、空穴的有效质量,使对应的薛定谔(Schrödinger)方程看上去非常简洁明了,物理图像清晰。最简单的有效质量近似假定体系为各向同性、抛物线形的单能带,得到的色散关系为

$$E_{c,v}(k) = \pm \left( \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{c,v}^*} \right) \quad (1-1)$$

式中,  $E_c$ ,  $E_v$  分别是导带电子、价带空穴的能量(零点能选在禁带中央),  $E_g$  是禁带宽度,  $k$  为波矢,  $m_c^*$  和  $m_v^*$  分别为电子和空穴的有效质量。  $m_c^*$  和  $m_v^*$  正比于  $E_g$ , 红外材料的  $E_g$  很小,意味着有效质量也很小。有效质量近似虽能给出异质结、量子阱或超晶格中电子态的基本形态,却无法描述广泛存在的非抛物带边,以及电子态、空穴态之间的耦合等。在处理微扰相互作用时,所谓的  $k \cdot p$  方法是非常有效的。 $k \cdot p$  方法无法给出整个倒晶格空间能带结构的完整描述,而只能给出如图 1-1 所示布里渊区的那些具有高对称性点附近的能带情况,但这些高对称点对半导体的光学、电学特性影响最大。尤其是,  $k \cdot p$  方法能给出这些高



对称性点附近半导体物理中非常有用的材料参数,如电子、空穴的有效质量以及波函数等。

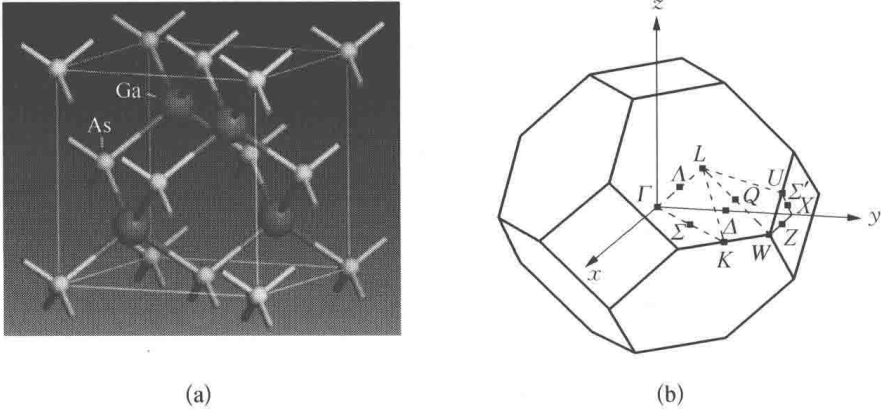


图 1-1 (a) GaAs 原胞; (b)  $k$  空间第一-布里渊区

电子在周期性势场中的运动必须满足 Bloch 定律,即电子波函数具有  $e^{ik \cdot r} u_{vk}(\mathbf{r})$  形式,其中  $v$  为能带指标。则描述电子态的薛定谔方程为

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] e^{ik \cdot r} u_{vk}(\mathbf{r}) = E_v(\mathbf{k}) e^{ik \cdot r} u_{vk}(\mathbf{r}) \quad (1-2)$$

式中,  $m_0$  为自由电子的有效质量,  $V_0(\mathbf{r})$  为周期性的晶体势场。上述方程并没有考虑电子自旋。将算符作用在波函数上,方程两边约去平面波部分  $e^{ik \cdot r}$ , 可得

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] u_{vk}(\mathbf{r}) = E_v(\mathbf{k}) u_{vk}(\mathbf{r}) \quad (1-3a)$$

或为简洁起见采用狄拉克符号  $e^{ik \cdot r} u_{vk}(\mathbf{r}) \equiv e^{ik \cdot r} \langle \mathbf{r} | v \mathbf{k} \rangle$ , 得

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] | v \mathbf{k} \rangle = E_v(\mathbf{k}) | v \mathbf{k} \rangle \quad (1-3b)$$

当考虑 Pauli 自旋-轨道相互作用  $H_{so} = -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^4} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla V(\mathbf{r})$  时, 式 (1-3b) 变为

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \right] | v \mathbf{k} \rangle = E_v(\mathbf{k}) | v \mathbf{k} \rangle \quad (1-4)$$

式中,