

由 k -线性项在半导体和半金属中诱导的光电流

M. M. Glazov[✉], E. L. Ivchenko[✉]

Ioffe Institute, 194021, St.-Petersburg, Russia

我们开发了一个六带 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型来描述手性多重半金属（如 RhSi）的电子结构和光学响应。通过不变量方法，我们构造了有效哈密顿量，描述布里渊区 Γ 点附近的能态，在这个过程中考虑了自旋轨道耦合和对圆光伏效应至关重要的 $\mathbf{k}$ 线性 Rashba 项。该模型使用紧束缚计算进行参数化。我们计算了带间吸收谱，显示在低能量下呈频率线性依赖，并且在自旋轨道分裂能量附近有一个共振特征。此外，我们还计算了圆光伏效应。与之前的研究一致，在低频下的电流生成率表现出一个由有效拓扑荷的普适值 $|C| = 4$ 所支配的量子化低频响应。我们的结果为理解 Rashba 耦合和拓扑在多重手性半金属的光电特性中的作用提供了分析框架。

介绍。拉什巴和谢卡首先引起了人们对存在于纤锌矿晶体的 Γ_7 导带和价带中的与自旋相关的线性项 $\mathbf{k}$ 的注意 [1]。这项工作成为研究自由电荷载流子有效哈密顿量中 $\mathbf{k}$ -线性贡献 $\mathcal{H}^{(1)}(\mathbf{k}) = \beta_{ij}\sigma_i k_j$ 的后果的研究起点，其中 σ_i 是泡利自旋矩阵， β_{ij} 是构成二阶伪张量的带参数。该张量耦合轨道和自旋动力学，即极向量分量 $\mathbf{k}$ 与轴向矢量分量 σ_i ，并且对于允许光学活性或旋光性的点群是非零的 [2]。事实上，依赖自旋的与 $\mathbf{k}$ 成线性的项是电子系统中的一个类似机械系统的现象，在这个现象中旋转运动与线性运动混合在一起，就像在螺旋桨和轮子效应中发生的那样。

自旋-轨道项 $\mathcal{H}^{(1)}(\mathbf{k})$ 的第一个结果是 Rashba 在参考文献 [3] 中预测的组合共振，这是由电磁场的电成分激发的自旋跃迁。另一个例子是在激子质心波矢线性项 $\mathbf{K}$ 的共振光学表现，即在 B-激子共振频率 [4] 附近的反射率光谱中的异常特征以及斜入射光下的 s - p 偏振转换现象 [5, 6]。自由电荷载流子哈密顿量中的 $\mathbf{k}$ 线性项在圆形光伏特效应 (CPGE) 中起主要作用，该效应在文献 [7] 中被预测，并由 Asnin 等人首次观察到 [8]，同样也在最近提出的圆偏振拉曼光电特效应 [9] 中发挥作用。CPGE 不仅在半导体和半导体纳米结构中进行了研究，请参阅文献 [10, 11] 综述，还在三维 Weyl 半金属 [12–16] 中进行了研究。已经表明，在没有反演和平移对称性的情况下，这类系统的圆偏振光电流以基本物理常数单位量化 [12]。

近年来，随着狄拉克和外尔半金属的研究，一类具有手性对称性和布里渊区多重简并点的拓扑半金属——多重简并半金属——也受到了关注，详见综述 [17, 18]。其中，一类具有空间对称性 $P2_13$ （空间群 $N=198$ ，手性点群 T ）的非磁性半金属尤为突出：一

系列二元化合物 MgPt、RhSi、RhSn、PdGa、PtGa、CoSi [17–25]，以及三元材料 PdBiSe、SrGePt、CaSiPt，... [26]。这种对称性允许四重和六重简并的拓扑点（或节点）的存在，并且对应于表面状态的费米弧 [27, 28]。正如在其他旋光晶体中一样，预科班可以确实存在于具有 T [17, 20, 27, 29–33] 点对称性的半金属中。到目前为止，这些材料的能量谱和 CPGE 的理论描述是通过微观数值计算进行的。在这篇论文中，我们将使用有效哈密顿方法来进行这种描述，这使我们能够获得解析结果并强调 $\mathbf{k}$ 线性、Rashba 项在这一效应中的重要性。

作为该方法效率的一个示例，我们考虑布里渊区中心附近电子的状态， Γ 。假设不考虑自旋和自旋轨道相互作用时， Γ 点的能态 E_0 是三重简并的，并且有效特征为角动量 $L = 1$ ， T 群的表示 Γ_4 。考虑到自旋后，简并度增加到六。考虑到自旋轨道相互作用，简并部分被解除，形成了四重态 $\Gamma_6 + \Gamma_7$ 和双重态 Γ_5 ，它们可以分别分配给角动量 $J = 3/2$ 和 $J = 1/2$ 。我们将有效的 6×6 哈密顿量 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ 在电子波矢 $\mathbf{k}$ 的幂次中展开，保留一阶和二阶项，并使用不变性方法找到线性无关的展开系数 [34–36]。通过比较使用原子建模和有效哈密顿量方法计算出的电子带结构的结果，我们可以参数化哈密顿量 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \mathcal{H}(\mathbf{k})$ 并计算光吸收和圆光电流的谱。这种方法的应用对于硅化物 RhSi、PtAl 和 CoSi 特别有效，这些硅化物的 $\Gamma_6 + \Gamma_7$ 和 Γ_5 能带靠近费米能级。

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -模型。让我们用 X, Y, Z 表示按照表示 Γ_4 转换的轨道函数，其坐标为 $x \parallel [100], y \parallel [010], z \parallel [001]$ 。对于自旋状态 $\pm 1/2$ ，我们引入两个基本旋量 $\alpha_{+\frac{1}{2}} \equiv \alpha = \uparrow$ 和 $\alpha_{-\frac{1}{2}} \equiv \beta = \downarrow$ 。六个乘积 $\alpha_s R_\eta (s = \pm 1/2, \eta = x, y, z), R_x = X, R_y = Y, R_z = Z$ ，构成了群 T 的表示

$\Gamma_4 \times \Gamma_5$ 的基础, 该表示分解为不可约旋量表示 $\Gamma_5 + \Gamma_6 + \Gamma_7$ 。我们扩展这些不可约表示的基函数 $\Psi_j (j = 1, 2, \dots, 6)$ 为函数 $\alpha_s R_\eta$ 的形式:

$$\Psi_j = \sum_{s\eta} C_{s,\eta}^{(j)} \alpha_s R_\eta. \quad (1)$$

对于表示 Γ_5 , 这个展开可以选取角动量 $J = 1/2$ 的基函数的形式:

$$\begin{aligned} |\Gamma_5, +1/2\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha Z + \beta(X + iY)], \\ |\Gamma_5, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}[\beta Z - \alpha(X - iY)]. \end{aligned} \quad (2)$$

二维表示 Γ_6 和 Γ_7 的基函数可以通过使用点群 $T[37]$ 的标准基函数表来构建。然而, 为了方便书写有效电子哈密顿量 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, 我们将使用线性组合的基函数, 这些基函数来自于表示 Γ_6 和 Γ_7 的基函数, 并且可以方便地分配给角动量 $J = 3/2$ 及其投影 $\pm 1/2, \pm 3/2$, 即:

$$\begin{aligned} |\Gamma_6 + \Gamma_7, +3/2\rangle &= -\alpha \frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \\ |\Gamma_6 + \Gamma_7, +1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}\alpha Z - \beta \frac{X + iY}{\sqrt{6}}, \\ |\Gamma_6 + \Gamma_7, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}\beta Z + \alpha \frac{X - iY}{\sqrt{6}}, \\ |\Gamma_6 + \Gamma_7, -3/2\rangle &= \beta \frac{X - iY}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (3)$$

这种基在构建具有闪锌矿结构的 T_d 对称性半导体晶体中 Γ_8 带的鲁廷哈密顿量时, 被 [10, 36] 一书采用。

这里给出了在 $\Gamma_6 + \Gamma_7 + \Gamma_5$ 带中的有效哈密顿量 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ 的表达式, 是通过忽略与其他 (远端) 带的状态之间的自旋轨道混合而得到的。利用不变量方法, 算符 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ 可表示为

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \ell \mathbf{k} \cdot \mathbf{I} + \frac{\Delta}{3} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{I} - \frac{\Delta}{3} \\ &+ Lk^2 - (L - M) \sum_i I_i^2 k_i^2 - N \sum_{i' \neq i} \{I_i I_{i'}\}_s k_i k_{i'}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是一个分量为泡利自旋矩阵 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的伪向量; I_i 是基底中函数作为坐标 x, y, z 变换的角动量矩阵 $L = 1$:

$$I_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, I_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, I_z = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

在构造哈密顿量 (4) 时, 考虑到 $\mathbf{k}$ 中线性项和二次项的矩阵在时间反演下必须分别为奇和偶。

引入以下六个基本函数 $\Psi_j (j = 1-6)$ 的顺序是有启发性的: 四个函数 Ψ_j 与展开式 (1) 中的 $j = 1-4$ 对应于状态 $|\Gamma_6 + \Gamma_7, m\rangle$ 与 $m = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$, 而函数 Ψ_5, Ψ_6 则对应于状态 $|\Gamma_5, m'\rangle$ 与 $m' = 1/2, -1/2$ 。在此基下, 有效哈密顿量取如下形式

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}^{(0)} + \hbar v_0 \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mathcal{J}} \\ &+ (A + \frac{5}{4}B) k^2 - B \sum_i \mathcal{J}_i^2 k_i^2 - \frac{D}{\sqrt{3}} \sum_{i' \neq i} \{\mathcal{J}_i \mathcal{J}_{i'}\}_s k_i k_{i'}. \end{aligned} \quad (5)$$

这里, 能量是以 $\Gamma_6 + \Gamma_7$ 态的能量为基准测量的, 矩阵 $\mathcal{H}^{(0)}$ 是对角线 6×6 矩阵, 仅包含两个非零元素 $-\Delta$, 其中 Δ 是在 Γ 点的自旋轨道劈裂,

$$A = \frac{L + 2M}{3}, B = \frac{L - M}{3}, N = \sqrt{3}D,$$

$\hbar v_0 = \frac{2}{3}\ell$, 而六维矩阵 $\mathcal{J}_i$ 与矩阵 I_i 的关系如下 (详见补充材料 (SM) [38] 的显式形式):

$$\mathcal{J}_{i;j'j} = \frac{3}{2} \sum_{s,\eta,\eta'} C_{s,\eta'}^{(j')*} I_{i;\eta'\eta} C_{s,\eta}^{(j)}. \quad (6)$$

当考虑远程带之间的自旋轨道混合时, 矩阵 $\mathcal{H}^{(1)}(\mathbf{k})$ 的结构变得更为复杂。其一般形式通过不变量方法获得, 见 SM [38]。有时在讨论具有 $J = 3/2$ 的电子准粒子时, 会将其与自旋为 $3/2$ 的基本粒子进行类比, 并使用术语 “Rarita-Schwinger-Weyl 费米子” [21, 28, 39–41]。对于 $\hbar v_0 k$ 或 Bk^2, Dk^2 可与 Δ 比较而言, 应考虑一个六带模型的哈密顿量 (4), 而不是 4×4 哈密顿量, 这种类比就失去了意义。这样的电子可以称为 $(1, \frac{1}{2})$ -费米子。与晶体中的准粒子不同, 自旋- $3/2$ 的相对论性粒子服从洛伦兹不变性, 在没有外部场的情况下不具有任何精细结构, 参见 §31 “自旋为 $3/2$ 的粒子的波动方程” 在参考文献 [42] 中。

图 1 显示了 RhSi 晶体的电子色散。面板 (a) 展示了在 [20] 中提出的紧密结合方法获得的能带 (另请参见 [29])。该模型与密度泛函理论吻合良好, 并且在较宽的能量范围内充分描述了能量谱。为了说明自旋轨道耦合的作用, 图 1(a) 中的虚线曲线显示了忽略自旋轨道相互作用的计算结果。可以看出, 在 ~ 1 eV 的能量尺度上, 自旋轨道耦合并不起决定性作用, 但它决定了我们感兴趣的布里渊区 Γ 点附近的谱的精细结构, 如图 1(b) 所示。

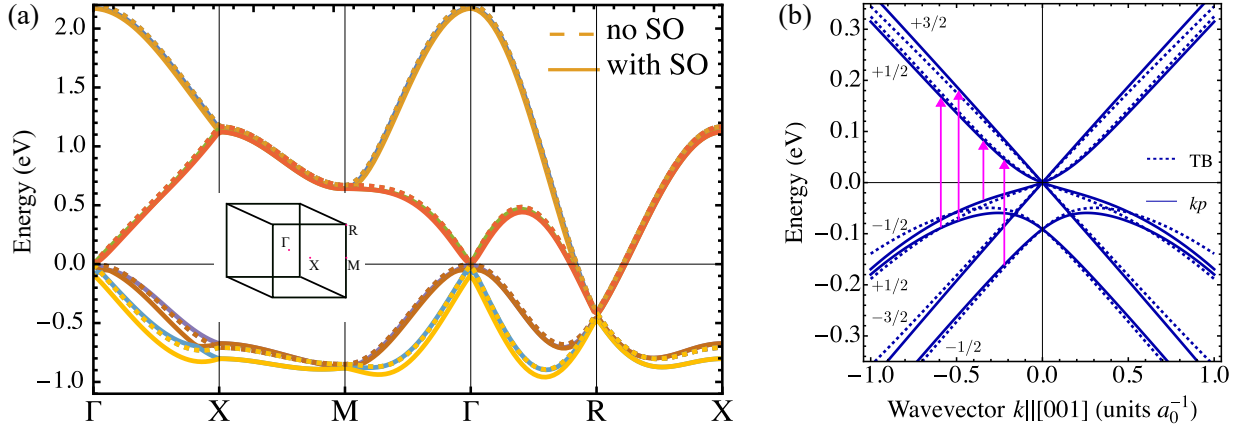


图 1: (a) 根据参考文献 [20] 使用紧束缚方法找到的 RhSi 中的电子分散。使用的紧束缚参数 (以 eV 为单位) [20] 是 $v_1 = 0.55, v_2 = 0.16, v_p = -0.76, v_{r1} = 0, v_{r2} = -0.03, v_{r3} = 0.01, v_{s1} = -0.04, v_{s2} = v_{s3} = 0$ 。虚线和实线分别表示忽略自旋轨道相互作用和包括自旋轨道相互作用的计算结果。插图显示了第一布里渊区的方案, 高对称点标记为 Γ, X, M 和 R 。(b) 使用紧束缚方法 (虚线) 以及在 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型中 (实曲线) 考虑自旋轨道相互作用时, 在 Γ 点附近的能谱。箭头表示允许的光学跃迁在 σ^+ 极化中的情况 (在各向同性模型中)。通过拟合紧束缚计算得到的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型参数见表 I。

为了参数化 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型, 我们扩展了补充材料第三部分给出的近似于 $\mathbf{k} = 0$ 处的紧束缚哈密顿量, 直到 $\mathbf{k}$ 的二次项。通过将计算得到的谱与有效哈密顿量 (5) 进行比较, 我们确定了 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型的参数, 见表 I。在计算误差范围内, 各向同性近似 $D = \sqrt{3}B$ 或方程 (4) 中的 $N = L - M$ 的一致性最好。在这个近似中, 电子态由确定的角动量分量 $\pm 1/2, \pm 3/2$ 在向量 $\mathbf{k}$ 上的投影来表征, 并且它们的能量 $E_n(\mathbf{k})$ 与 $\mathbf{k}$ 的方向无关。也值得注意的是, 在这种参数化中, 不需要考虑与远带之间的自旋-轨道混杂: 所有线性 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 项都由非相对论常数 $\hbar v_0$ 决定。图 1(b) 显示了 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 计算 (实线) 与 $\mathbf{k} \parallel [001]$ 的紧束缚计算的比较。能量谱的解析表达式见 SM [38]。

能带间的吸收接近布里渊区的 Γ 点。现在我们来计算 RhSi 晶体的带间跃迁吸收光谱。 6×6 速度算子

表 I: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型基于紧束缚方法的参数化。晶格常数 $a_0 = 4.67 \text{ \AA}$ [29, 43], 紧束缚参数 v_1, v_2 和 v_p 的值在图 1 的标题中给出。参数 v_i 表示的 Δ 的复杂表达式在附录 SM [38] 中给出。

Parameter	Value
Δ	91 meV
ℓ	$\frac{v_p a_0}{2}$
L	$\frac{v_2^2 a_0^2}{2} - \frac{v_p^2 a_0^2}{16 v_1}$
M	$\frac{v_1^2 a_0^2}{4} - \frac{v_2^2 a_0^2}{2} - \frac{v_p^2 a_0^4}{16 v_1}$
N	$L - M$

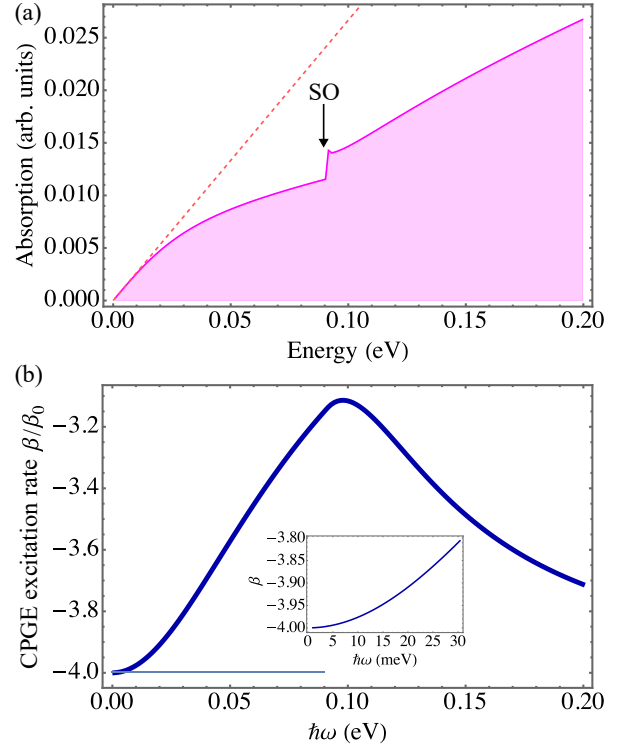


图 2: (a) 在 Fermi 能量 $E_F = 0$ 下, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型中计算的带间光学跃迁吸收光谱。虚线显示了在 ω 上的线性外推。(b) 与量化电流常数相关的 CPGE 激发率系数 β 。细水平线表示通用值 -4 , 参见方程 (12) 和正文中的详细说明。插图显示了低频下的放大视图。

以标准形式写为:

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (7)$$

速度算子的矩阵元通过哈密顿量的本征列表示为

$$\mathbf{v}_{n'n}(\mathbf{k}) = \hat{C}_{n'}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{k}) \hat{C}_n(\mathbf{k}), \quad (8)$$

相应地, 与跃迁 $n \rightarrow n'$ 相关的吸收系数贡献读作

$$K_{n'n} = \frac{4\pi^2 e^2}{\omega c n_\omega V} \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_{n'n}(\mathbf{k})|^2 \times (f_{n\mathbf{k}} - f_{n'\mathbf{k}}) \delta[E_{n'}(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k}) - \hbar\omega], \quad (9)$$

其中 $\mathbf{e}$ 是光的单位极化矢量, V 是样品体积, $f_{n\mathbf{k}}$ 是电子分布函数, 而 $E_n(\mathbf{k})$ 是能带 n 的色散。

图 2(a) 显示了 RhSi 的吸收光谱, 这是由于带间跃迁计算得出的, 计算是在 $K(\hbar\omega) = \sum_{n,n'} K_{n',n}$ 后进行的, 其中系数 $K_{n',n}$ 由方程 (9) 确定。在小频率 $K \propto \hbar\omega$ 下, 预期对于具有 k -线性谱的块体系统, $\hbar\omega \approx 90$ 毫电子伏特处的特征与由于上带和下带角动量分量 $\langle \mathcal{J} \cdot \mathbf{k} \rangle / k = 1/2$ 的简并密度状态中的逆平方根奇异性引起的吸收开始相关。

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型中的圆形光电流。现在我们继续进行我们的主要研究成果, 即圆偏光光电效应 (CPGE) 的理论。参照文献。[12] 我们计算由

$$\frac{dj}{dt} = i[\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*] \beta E_0^2. \quad (10)$$

定义的 CPGE 注入电流这里, 如前所述, $\mathbf{e}$ 是光的单位极化矢量, E_0 是晶体内部的场幅值, 叉积 $i[\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*]$ 可以通过圆偏振度 P_{circ} 和光波矢量 $\mathbf{q}$ 表示为 $P_{\text{circ}} \mathbf{q} / q$ 。微观参数 β 是部分贡献的和

$$\beta_{n'n} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^3}{\omega^2 V} \sum_{\mathbf{k}} (v_{n'\mathbf{k};z} - v_{n\mathbf{k};z}) |\mathbf{e}_{\sigma_+} \cdot \mathbf{v}_{n'n}(\mathbf{k})|^2 \times (f_{n\mathbf{k}} - f_{n'\mathbf{k}}) \delta[E_{n'}(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k}) - \hbar\omega], \quad (11)$$

其中群速度的 z 分量为 [参见 (7)] $v_{n\mathbf{k};z} = \hbar^{-1} \partial E_n(\mathbf{k}) / \partial k_z$ 。 σ_+ 偏振光沿 z 轴传播的单位向量是 $\mathbf{e}_{\sigma_+} = (\hat{x} + i\hat{y}) / \sqrt{2}$, 其中 $\hat{x}, \hat{y}$ 是相应轴上的单位向量。

图 2b 展示了计算得到的圆偏振光电流激发谱与光子能量 $\hbar\omega$ 的关系。一个三维 Weyl 谷具有通用的圆周光电流生成速率值, 方程 (10) 中的系数 β 由 [16, 20,

29, 44] 给出

$$\beta = C\beta_0, \quad \beta_0 = \frac{\pi}{3} \frac{e^3}{\hbar^2}, \quad (12)$$

其中 $h = 2\pi\hbar$ 和 $C = -4$ 是节点的拓扑荷。在图 2b 中, 光电流生成速率作为光频率的函数被显示出来。可以看出, 在 $\hbar\omega \rightarrow 0$ 处, 比率趋向于由方程 (12) 描述的细线所指示的 -4 值。

随着能量 $\hbar\omega$ 的增加, 比率 β/β_0 明显偏离 -4 , 这是由于能量色散中的非线性项。对于 β , 在 $\hbar\omega = 90\text{meV}$ 附近的特殊性不存在, 因为状态密度中的奇异性被方程 (11) 中的差异 $v_{n'\mathbf{k};z} - v_{n\mathbf{k};z}$ 补偿。在稳态激励下, 圆形光电流宏观上由

$$\mathbf{j} = i[\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*] \gamma E_0^2. \quad (13)$$

描述系数 γ 是求和 $\sum_{n,n'} \gamma_{n',n}$ 其中部分贡献由方程 (11) 给出, 其中速度差被替换为 (参见参见 [7, 10, 45])

$$v_{n'\mathbf{k};z} \tau_{n'} - v_{n\mathbf{k};z} \tau_n,$$

其中, τ_n 是带 n 中电子的动量弛豫时间, 一般来说它是能量相关的。由于不同带中的 τ_n 值不相同, CPGE 电流 (13) 的频率依赖性呈现出类似于图 2a 所示的特征。

RhSi 中的 CPGE 由 Le Congcong 等人计算。[31]. 本文的图 1d 显示了区间 0.1–2 eV 内 $\beta(\hbar\omega)/\beta_0$ 作为 $\hbar\omega$ 的函数的比例。可以看出, 在图 2b 中, 与 [31] 一致, 这个比例在 0.1–0.2 eV 的区间内减少。与 Ref. 相对照 [20] 所开发的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型使我们在低频区域 $\hbar\omega \leq 0.1\text{eV}$ 进行计算成为可能。使用各向同性近似处理能带结构显著减少了 CPGE 注入率评估中的数值误差, 并允许我们研究偏离量化值 (12) 的情况, 参见。参考文献 [29]。

结果与结论。我们开发了一个 6×6 有效的哈密顿量 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ 描述手性半金属 (例如, RhSi, CoSi) 中接近 Γ 点的电子状态, 这些材料的空间群为 $P2_13$, 点群为 T 。该哈密顿量包括线性的 $\mathbf{k}$ Rashba 项和波矢二次贡献, 解释了自旋轨道耦合和能带简并。

模型使用基于先前工作的紧束缚计算进行参数化。

计算得到的靠近 Γ 点的能带结构揭示了自旋轨道耦合导致的一个四重态 $\Gamma_6 + \Gamma_7$ 和一个双重态 Γ_5 。我们已经计算出了吸收光谱, 在低频时它是频率 ω 的线性函数, 这是具有 $\mathbf{k}$ -线性色散的体系系统的特点。圆光电流效应 (即产生对光的圆偏振敏感的光电流) 在开发的

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量方法中被计算和分析。在低频时, 光电流生成率接近一个普遍的量子化值。 $\mathbf{k}$ -线性的 Rashba 项对于 CPGE 是至关重要的, 在低频极限下使光电流量子化。

致谢。本工作得到了俄罗斯科学基金会 (RSF) 资助项目 23-12-00142 的支持。作者感谢 L.E. Golub 的有益讨论。

-
- [1] E.I. Rashba, V.I. Sheka, Symmetry of energy bands in crystals of wurtzite type: II. Symmetry of bands with spin-orbit interaction included, *Fizika tverdogo tela*, Coll. of Articles, vol. 2, 162 (1959) [English translation: Supplemental Material to the paper by G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, *New J. Phys.* **17**, 050202 (2015)].
 - [2] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, Oxford, 1960, §104.
 - [3] E.I. Rashba, Properties of semiconductors with an extremum loop: I. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop, *Fizika Tverd. Tela* **2**, 1224 (1960) [*Sov. Phys.-Solid State* **2**, 1109 (1960)].
 - [4] G.D. Mahan, J.J. Hopfield, Optical effects of energy terms linear in wave vector, *Phys. Rev.* **135**, A428 (1964).
 - [5] E.L. Ivchenko, A.V. Sel'kin, Natural optical activity in wurtzite-structure semiconductors, *Sov. Phys. JETP* **49**, 933 (1979).
 - [6] E.L. Ivchenko, Spatial dispersion effects in the exciton resonance region, *Modern Problems in Condensed Matter Sci.*, v.2, Excitons, ed. E.I. Rashba and M.D. Sturge, North-Holland, 1982, p.141.
 - [7] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus, *JETP Lett.* **27**, 604 (1978).
 - [8] V.M. Asnin, A.A. Bakun, A.M. Danishevskii, E.L. Ivchenko, G.E. Pikus, A.A. Rogachev, *JETP Lett.* **28**, 74 (1978).
 - [9] L. E. Golub and M. M. Glazov, Raman photogalvanic effect: Photocurrent at inelastic light scattering, *Phys. Rev. B* **106**, 205205 (2022).
 - [10] E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures* (Alpha Science International, Harrow, UK, 2005).
 - [11] S. D. Ganichev and L. E. Golub, Interplay of Rashba/Dresselhaus spin splittings probed by photogalvanic spectroscopy – A review, *physica status solidi (b)* **251**, 1801 (2014).
 - [12] F. de Juan, A.G. Grushin, T. Morimoto, J.E. Moore, *Nat. Commun.* **8**, 15995 (2017).
 - [13] N.P. Armitage, E.J. Mele, A. Vishwanath, Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
 - [14] Guoqing Chang, B.J. Wieder, F. Schindler, D.S. Sanchez, I. Belopolski, Shin-Ming Huang, B. Singh, Di Wu, Tay-Rong Chang, T. Neupert, Su-Yang Xu, Hsin Lin, M.Z. Hasan, Topological quantum properties of chiral crystals, *Nat. Mater.* **17**, 978 (2018).
 - [15] L.E. Golub, E.L. Ivchenko, B.Z. Spivak, Photocurrent in gyrotropic Weyl semimetals, *Pis'ma ZhETF* **105**, 744 (2017) [*JETP Lett.* **105**, 782 (2017)].
 - [16] N.V. Leppenen, E.L. Ivchenko, L.E. Golub, Circular photocurrent in Weyl semimetals with mirror symmetry, *ZhETF* **156**, 167 (2019) [*JETP* **129**, 139 (2019)].
 - [17] Congcong Le, Yan Sun, Topology and symmetry of circular photogalvanic effect in the chiral multifold semimetals: a review, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 503003 (2021).
 - [18] B.J. Wieder, B. Bradlyn, J. Cano, Zhijun Wang, M.G. Vergniory, L. Elcoro, A.A. Soluyanov, C. Felser, T. Neupert, N. Regnault, B.A. Bernevig, Topological materials discovery from crystal symmetry, *Nat. Rev. Mater.* **7**, 196 (2022).
 - [19] B. Bradlyn, J. Cano, Z. Wang, M.G. Vergniory, C. Felser, R.J. Cava, B.A. Bernevig, Beyond Dirac and Weyl fermions: Unconventional quasiparticles in conventional crystals, *Science* **353**, aaf5037 (2016).
 - [20] Guoqing Chang, Su-Yang Xu, B.J. Wieder, D.S. Sanchez, Shin-Ming Huang, I. Belopolski, Tay-Rong Chang, Songtian Zhang, A. Bansil, Hsin Lin, M.Z. Hasan, Unconventional chiral fermions and large topological Fermi arcs in RhSi, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 206401 (2017).
 - [21] Peizhe Tang, Quan Zhou, Shou-Cheng Zhang, Multiple types of topological fermions in transition metal silicides, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 206402 (2017).
 - [22] D.A. Pshenay-Severin, Yu.V. Ivanov, A.A. Burkov, A.T. Burkov, Band structure and unconventional electronic topology of CoSi, *J.Phys.: Condens. Matter* **30**, 135501 (2018).
 - [23] D.A. Pshenay-Severin, A.T. Burkov, Electronic structure

- of B20 (FeSi-type) transition-metal monosilicides, *Materials* **12**, 2710 (2019).
- [24] L. Z. Maulana, Z. Li, E. Uykur, K. Manna, S. Polatkan, C. Felser, M. Dressel, A.V. Pronin, Broadband optical conductivity of the chiral multifold semimetal PdGa, *Phys. Rev. B* **103**, 115206 (2021).
- [25] S.M. Stishov, A.E. Petrova, Thermodynamic, elastic, and electronic properties of substances with a chiral crystal structure: MnSi, FeSi, *Uspechi Fiz. Nauk* **193**, 614 (2023) [*Physics–Uspekhi* **66**, 576 (2023)].
- [26] Yi Shen, Yahui Jin, Yongheng Ge, Mingxing Chen, Ziming Zhu, Chiral topological metals with multiple types of quasiparticle fermions and large spin Hall effect in the SrGePt family materials, *Phys. Rev. B* **108**, 035428 (2023).
- [27] D. Rees, Baozhu Lu, Yue Sun, K. Manna, Rüstem Özgür, S. Subedi, C. Felser, J. Orenstein, D.H. Torchinsky, Direct measurement of helicoid surface states in RhSi using nonlinear optics, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 157405 (2021).
- [28] J.A. Krieger, S. Stolz, I. Robredo et al., Weyl spin-momentum locking in a chiral topological semimetal, *Nat. Commun.* **15**, 3720 (2024).
- [29] F. Flicker, F. de Juan, B. Bradlyn, T. Morimoto, Maia G. Vergniory, A.G. Grushin, Chiral optical response of multifold fermions, *Phys. Rev. B* **98**, 155145 (2018).
- [30] Yang Zhang, F. de Juan, A.G. Grushin, C. Felser, Yan Sun, Strong bulk photovoltaic effect in chiral crystals in the visible spectrum, *Phys. Rev. B* **100**, 245206 (2019).
- [31] Congcong Le, Yang Zhang, C. Felser, Yan Sun, *Ab initio* study of quantized circular photogalvanic effect in chiral multifold semimetals, *Phys. Rev. B* **102**, 121111 (2020).
- [32] Zhuoliang Ni, K. Wang, Y. Zhang, O. Pozo, B. Xu, X. Han, K. Manna, J. Paglione, C. Felser, A.G. Grushin, F. de Juan, E.J. Mele, Liang Wu, Giant topological longitudinal circular photo-galvanic effect in the chiral multifold semimetal CoSi, *Nat. Commun.* **12**, 154 (2021).
- [33] Artem V. Pronin, *Linear Electrodynamical Response of Topological Semimetals. Experimental Results Versus Theoretical Predictions* (Springer, Cham, 2023).
- [34] G.L. Bir, G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974).
- [35] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus: *Superlattices and Other Heterostructures*, 2nd edn., Vol. 110 of Solid-State Sciences (Springer, Berlin, Heidelberg, 1997).
- [36] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer, Berlin, Heidelberg, 2003).
- [37] G.F. Koster, J.O. Dimmock, R.G. Wheeler, H. Statz, *Properties of the Thirty-Two Point Groups*, MIT Press (1963).
- [38] Online Supplementary Materials.
- [39] Long Liang, Yue Yu, Semimetal with both Rarita–Schwinger–Weyl and Weyl excitations, *Phys. Rev. B* **93**, 045113 (2016).
- [40] I. Boettcher, Interplay of topology and electron-electron interactions in Rarita–Schwinger–Weyl semimetals, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 127602 (2020).
- [41] Z.V. Khaidukov, Chiral separation effect in Rarita–Schwinger–Weyl semimetals, *Pisma ZhETP* **113**, 21 (2021) [*JETP Lett.* **113**, 18 (2021)].
- [42] V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics, Second Edition* (vol. 4) (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1999).
- [43] S. Geller and E. A. Wood, The crystal structure of rhodium silicide, RhSi, *Acta Crystallographica* **7**, 441 (1954).
- [44] F. de Juan, A. G. Grushin, T. Morimoto, and J. E. Moore, Quantized circular photogalvanic effect in Weyl semimetals, *Nature Communications* **8**, 15995 (2017).
- [45] M.M. Glazov, E.L. Ivchenko, M.O. Nestoklon, Effect of pressure on the electronic band structure and circular photocurrent in tellurium, *JETP* **135**, 575-587 (2022).