

тяжелых дырок. Таким образом, получаем, что g -фактор экситона зависит от его волнового вектора.

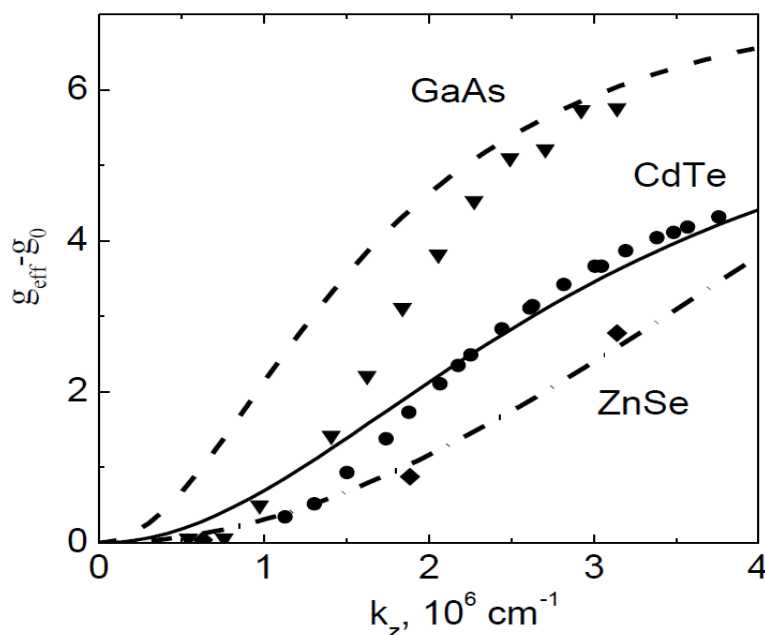


Рис 8.1 Поправки к эффекту Зеемана (к g -фактору) основного состояния экситона связанные с пространственной дисперсией в разных структурах с широкими (ширина ямы много больше боровского радиуса экситона) квантовыми ямами как функция волнового вектора экситона как целого k .

Как было показано в главе 5, вклад зеемановского расщепления в резонансный эффект Фарадея определяется g -фактором экситона. Поправка к постоянной Верде, связанная с пространственной дисперсией, в этом случае определяется аналогично (5.27).

Несмотря на то, что микроскопическое рассмотрение проведено для конкретной модели экситона большого радиуса в кристаллах с вырожденной валентной зоной, эти выводы справедливы и в общем случае эффектов Зеемана и Фарадея вдали от экситонных резонансов.

Слагаемое $C_{ijklm}^{(3)}(\omega)k_k H_l H_m$ пропорциональное первой степени волнового вектора, отлично от нуля только в кристаллах, не имеющих центра инверсии, оно мало и до сих пор не проявлялось в экспериментах, и мы его рассматривать не будем.

Слагаемое $C_{ijklmn}^{(4)}(\omega)k_k k_l H_m H_n$ представляет собой поправки к эффекту Фогта (Котона-Мутона).

Вклад этих поправок в тензор диэлектрической проницаемости кубического кристалла в геометрии, когда $k_x = k_y = 0$, $H_x = H_y = 0$, выглядит так:

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, k^2, H^2) = \begin{pmatrix} Bk_z^2 H_z^2 & Ak_z^2 H_z^2 & Ak_z^2 H_z^2 \\ Ak_z^2 H_z^2 & Bk_z^2 H_z^2 & Ak_z^2 H_z^2 \\ Ak_z^2 H_z^2 & Ak_z^2 H_z^2 & Bk_z^2 H_z^2 \end{pmatrix} \quad (9.4)$$

Наличие вещественных недиагональных компонент этого тензора указывает на, что в этой геометрии имеет место двулучепреломление.

9. Заключение

Мы рассмотрели с единых позиций некоторые (далеко не все) магнитооптические явления, которые могут наблюдаться в объемных кристаллах и гетероструктурах. Как видно, многие наблюдаемые явления можно детально описать, не используя конкретные модели вещества. Достаточно знать, какие компоненты тензора диэлектрической проницаемости проявляются в той или иной геометрии эксперимента, что также можно установить, зная симметрию кристалла или гетероструктуры.

Приложение 1. Механический экситон

Предположим, что один из атомов кристалла оказался в возбужденном состоянии. Так как все атомы в кристалле эквивалентны, то это возбуждение может свободно перемещаться от атома к атому без изменения энергии. Это и есть экситон, то есть возбужденное состояние всего кристалла, но не отдельных его частей.

Рассмотрим одну из моделей экситона, типичную для полупроводниковых кристаллов – экситон большого радиуса (Ванье-Мотта). Эта модель может быть получена из рассмотрения многоэлектронного гамильтониана кристалла. В основе этого лежит полный гамильтониан многоэлектронной системы кристалла:

$$\hat{H}_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = -\sum_i \hat{H}_i(\mathbf{r}_i) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (\text{П1.1})$$

$$\hat{H}_i(\mathbf{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - V(\mathbf{r}_i)$$

$$\hat{H}_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) ,$$

где $V(\mathbf{r}_i)$ периодический потенциал кристалла.

Волновую функцию основного состояния кристалла можно выбрать в виде антисимметризованного произведения (детерминанта) составленного из одноэлектронных атомных функций $a_l(\mathbf{r}_m)$:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} a_1(\mathbf{r}_1) & a_2(\mathbf{r}_1) & \dots & a_N(\mathbf{r}_1) \\ a_1(\mathbf{r}_2) & a_2(\mathbf{r}_2) & \dots & a_N(\mathbf{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_1(\mathbf{r}_N) & a_2(\mathbf{r}_N) & \dots & a_N(\mathbf{r}_N) \end{bmatrix} . \quad (\text{П1.2})$$

При таком выборе волновой функции легко проследить движение экситона по кристаллу и его используют в модели экситона Френкеля. Волновую функцию также можно выбрать в виде детерминанта, составленного из блоховских функций $\varphi_{l,k}(\mathbf{r}_m)$ заполненной зоны:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \varphi_{1,k_1}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{2,k_2}(\mathbf{r}_1) & \dots & \varphi_{N,k_N}(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_{1,k_1}(\mathbf{r}_2) & \varphi_{2,k_2}(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_{N,k_N}(\mathbf{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{1,k_1}(\mathbf{r}_N) & \varphi_{2,k_2}(\mathbf{r}_N) & \dots & \varphi_{N,k_N}(\mathbf{r}_N) \end{bmatrix} . \quad (\text{П1.3})$$

Такой выбор удобен для экситона большого радиуса. В качестве одноэлектронных волновых функций следует выбирать решения системы одноэлектронных уравнений Хартри-Фока

$$\hat{H}_{HF} \varphi_i = E_i \varphi_i . \quad (\text{П1.4})$$

Здесь

$$\hat{H}_{HF} = \hat{H}_i + V_{coul}(\mathbf{r}_i) + V_{exch}(\mathbf{r}_i) \quad (\text{П1.5})$$

- одноэлектронный гамильтониан Хартри Фока:

$$V_{coul}(\mathbf{r}_1)\varphi_i(\mathbf{r}_1) = \sum_j \varphi_j(\mathbf{r}_1) \int \varphi_j(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_j(\mathbf{r}_2) d\tau_2 \quad (\text{П1.6})$$

- кулоновское слагаемое,

$$V_{exch}(\mathbf{r}_1)\varphi_i(\mathbf{r}_1) = -\sum_j \varphi_j(\mathbf{r}_1) \int \varphi_j(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_i(\mathbf{r}_2) d\tau_2 \quad (\text{П1.7})$$

- обменное взаимодействие между электронами, $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$

Благодаря усреднению кулоновского и обменного взаимодействия в уравнениях Хартри – Фока каждый электрон движется в усредненном поле всех остальных электронов. Усредненные уравнения движения годятся для описания не только заполненных состояний валентной зоны, но и состояний зоны проводимости. Полученные одноэлектронные состояния не зависят от заполнения электронами спектра состояний, электроны в этом приближении просто заполняют весь спектр разрешенных состояний согласно статистике Ферми. Умножая (П1.4) слева на $\langle \varphi_i |$, получим одноэлектронные энергии основного состояния в первом порядке теории возмущений в приближении Хартри Фока:

$$E_i = \langle \varphi_i | H_i | \varphi_i \rangle + \sum_j \left[\langle \varphi_i \varphi_j | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_j \varphi_i \rangle \right]. \quad (\text{П1.8})$$

Энергия в (П1.8) представляет собой энергию электрона, движущегося в периодическом поле кристалла. В однозонном приближении эффективной массы, вблизи экстремумов зон, эта энергия равна

$$E_i(\mathbf{k}) = E_i(0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \frac{k_\alpha k_\beta}{m_{\alpha\beta}}.$$

Оба подхода, с блоховскими функциями или с атомными функциями дают одинаковый результат. Волновую функцию возбужденного состояния кристалла выбирают в виде такого же детерминанта, в котором волновые функции валентной зоны φ_i одного из столбцов заменены на функции зоны проводимости $\tilde{\varphi}_i$. Остальные функции при этом не меняются [3, 4, 5]:

$$\Phi_{i, k_1, k_2}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{1k_1}(\mathbf{r}_1) & \dots & \tilde{\varphi}_{ik_2}(\mathbf{r}_1) & \dots & \varphi_{Nk_1}(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_{1k_1}(\mathbf{r}_2) & \dots & \tilde{\varphi}_{ik_2}(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_{Nk_1}(\mathbf{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{1k_1}(\mathbf{r}_N) & \dots & \tilde{\varphi}_{ik_2}(\mathbf{r}_N) & \dots & \varphi_{Nk_1}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (\text{П1.9})$$

Это приближение эквивалентно пренебрежению динамической поляризацией электронной системы.

Найдем разность энергий возбужденного и основного состояний кристалла. Для этого рассмотрим сначала диагональные матричные элементы многоэлектронного гамильтониана (П1.1):

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_{i,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} | \hat{H}_e | \Phi_{i,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{H}_e | \Psi_0 \rangle = \langle \tilde{\varphi}_i | \hat{H}_i | \tilde{\varphi}_i \rangle - \langle \varphi_i | \hat{H}_i | \varphi_i \rangle + \\
& + \sum_j \left[\langle \tilde{\varphi}_i \varphi_j | \frac{e^2}{r_{12}} | \tilde{\varphi}_i \varphi_j \rangle - \langle \tilde{\varphi}_i \varphi_j | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_j \tilde{\varphi}_i \rangle \right] - \\
& - \left[\langle \tilde{\varphi}_i \varphi_i | \frac{e^2}{r_{12}} | \tilde{\varphi}_i \varphi_i \rangle - \langle \tilde{\varphi}_i \varphi_i | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_i \tilde{\varphi}_i \rangle \right] - \\
& - \sum_j \left[\langle \varphi_i \varphi_j | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_j \varphi_i \rangle \right]
\end{aligned} \quad (П1.10)$$

Пусть одноэлектронная волновая функция возбужденного состояния $\tilde{\varphi}_i$ удовлетворяет уравнениям Хартри Фока с операторами V_{coul} и V_{exc} (П1.6) и (П1.7), тогда (П1.10) примет вид:

$$\langle \Phi_{i,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} | \hat{H}_e | \Phi_{i,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{H}_e | \Psi_0 \rangle = \tilde{E}_i(\mathbf{k}_2) - E_i(\mathbf{k}_1) - \left[\langle \tilde{\varphi}_i \varphi_i | \frac{e^2}{r_{12}} | \tilde{\varphi}_i \varphi_i \rangle - \langle \tilde{\varphi}_i \varphi_i | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_i \tilde{\varphi}_i \rangle \right]. \quad (П1.11)$$

Как правило, энергия электрон дырочного взаимодействия в (П1.11) много меньше ширины запрещенной зоны $\tilde{E}_i - E_i$. Тогда:

$$\langle \Phi_{i,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} | \hat{H}_e | \Phi_{i,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{H}_e | \Psi_0 \rangle \approx \tilde{E}_i(\mathbf{k}_2) - E_i(\mathbf{k}_1). \quad (П1.12)$$

Получаем, что разность средних значений многоэлектронного гамильтониана на детерминантных волновых функциях возбужденного и основного состояний равна разности соответствующих Хартри-Фоковских одноэлектронных энергий (*приближение Купмэнса*).

Отсюда также следует, что энергия любого одноэлектронного состояния в приближении Хартри-Фока совпадает с энергией, необходимой для удаления электрона из кристалла (*теорема Купмэнса*).

При учете спина многоэлектронная функция основного состояния кристалла соответствует полному электронному спину равному нулю. В качестве пробной функции возбужденного состояния удобно составить комбинации волновых функций $\Phi_{i,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ с определенной спиновой мультиплетностью:

$$\Phi_{c\mathbf{k}_e, 1/2; \nu\mathbf{k}_h, -1/2}, \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Phi_{c\mathbf{k}_e, 1/2; \nu\mathbf{k}_h, 1/2} - \Phi_{c\mathbf{k}_e, -1/2; \nu\mathbf{k}_h, -1/2} \right), \Phi_{c\mathbf{k}_e, -1/2; \nu\mathbf{k}_h, 1/2}$$

Для триплетных состояний с полным спином равным 1.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Phi_{c\mathbf{k}_e, 1/2; \nu\mathbf{k}_h, 1/2} + \Phi_{c\mathbf{k}_e, -1/2; \nu\mathbf{k}_h, -1/2} \right)$$

Для синглетных состояний с полным спином 0. Обозначим функции с заданной мультиплетностью:

$$\Phi_{\mathbf{ck}_e, \mathbf{vk}_h}^{(M)}$$

где: M равно нулю для синглетных состояний и равно 1 для триплетных состояний.
Тогда с учетом спина вместо (П1.11) получим:

$$\left\langle \Phi_{\mathbf{ck}_e, \mathbf{vk}_h}^{(M)} \left| \hat{H}_e \right| \Phi_{\mathbf{ck}_e, \mathbf{vk}_h}^{(M)} \right\rangle - \langle \Psi_0 | \hat{H}_e | \Psi_0 \rangle = \tilde{E}_i - E_i - \left[\left\langle \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \varphi_{\mathbf{vk}_h} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \varphi_{\mathbf{vk}_h} \right\rangle - 2\delta_M \left\langle \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \varphi_{\mathbf{vk}_h} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \varphi_{\mathbf{vk}_h} \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \right\rangle \right] \quad (\text{П1.13})$$

где $\delta_M = 1$ для синглетного состояния и $\delta_M = 0$ для триплетного.

Рассмотрим теперь недиагональные матричные элементы гамильтониана (П1.1). В силу трансляционной симметрии отличны от нуля только те недиагональные матричные элементы, которые отвечают электрон - дырочным парам с одним и тем же полным волновым вектором $\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h = \mathbf{K}_{exc} = const$. Прямое вычисление дает:

$$\left\langle \Phi_{\mathbf{ck}_e, \mathbf{vk}_h}^{(M)} \left| \hat{H}_e \right| \Phi_{\mathbf{ck}'_e, \mathbf{vk}'_h}^{(M)} \right\rangle = 2\delta_M \left\langle \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \varphi_{\mathbf{vk}'_h} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \varphi_{\mathbf{vk}_h} \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}'_e} \right\rangle - \left\langle \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \varphi_{\mathbf{vk}'_h} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}'_e} \varphi_{\mathbf{vk}_h} \right\rangle. \quad (\text{П1.14})$$

Рассмотрим, сначала второе слагаемое в (П1.14)

$$\left\langle \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \varphi_{\mathbf{vk}'_h} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}'_e} \varphi_{\mathbf{vk}_h} \right\rangle = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e^2}{r_{12}} \exp[-i(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}'_e) \cdot \mathbf{r}_1] \exp[-i(\mathbf{k}'_h - \mathbf{k}_h) \cdot \mathbf{r}_2] \times \quad (\text{П1.15})$$

$$\times u_{\mathbf{ck}_e}^*(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{ck}'_e}(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{vk}'_h}(\mathbf{r}_2) u_{\mathbf{vk}_h}(\mathbf{r}_2)$$

Разложим периодические блоховские амплитуды $u_{\mathbf{ck}_e}^*(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{ck}'_e}(\mathbf{r}_1)$ и $u_{\mathbf{vk}'_h}(\mathbf{r}_2) u_{\mathbf{vk}_h}(\mathbf{r}_2)$ по плоским волнам с волновым вектором обратной решетки

$$u_{\mathbf{ck}_e}^*(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{ck}'_e}(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{vk}'_h}(\mathbf{r}_2) u_{\mathbf{vk}_h}(\mathbf{r}_2) = \sum_{m,n} a_{mn} \exp(i\mathbf{g}_m \cdot \mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{g}_n \cdot \mathbf{r}_2). \quad (\text{П1.16})$$

где

$$a_{mn} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(-i\mathbf{g}_m \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-i\mathbf{g}_n \cdot \mathbf{r}_2) u_{\mathbf{ck}_e}^*(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{ck}'_e}(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{vk}'_h}(\mathbf{r}_2) u_{\mathbf{vk}_h}(\mathbf{r}_2). \quad (\text{П1.17})$$

В длинноволновом пределе, пренебрегая слабой зависимостью $u_{\mathbf{ck}}(\mathbf{r})$ и $u_{\mathbf{vk}}(\mathbf{r})$ от волнового вектора, получим: $a_{00} \approx 1$, все остальные a_{mn} положим равными нулю. Это в точности то же самое, что переход к однозонному приближению в методе эффективной массы. Подставив (П1.16) в (П1.15) получим:

$$\left\langle \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}_e} \varphi_{\mathbf{vk}'_h} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}'_e} \varphi_{\mathbf{vk}_h} \right\rangle = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e^2}{r_{12}} \exp[-i(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}'_e) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] = \quad (\text{П1.18})$$

$$= \int d\mathbf{r} \frac{e^2}{r} \exp[-i(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}'_e) \cdot \mathbf{r}]$$

Со вторым слагаемым в (П1.14) так поступить нельзя. Дело в том, что обменное взаимодействие, в отличие от кулоновского, является короткодействующим. Это значит, что в (П1.17) необходимо учитывать коротковолновые гармоники. Подробное вычисление обменного вклада в рамках приближения эффективной массы можно найти, например, в книге [16]. Мы просто обозначим его $J_{cv} \delta_M$, тогда:

$$\left\langle \Phi_{c\mathbf{k}_e, v\mathbf{k}_h}^{(M)} \left| \hat{H}_e \right| \Phi_{c\mathbf{k}'_e, v\mathbf{k}'_h}^{(M)} \right\rangle \approx - \int d\mathbf{r} \frac{e^2}{r} \exp[-i(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}'_e) \cdot \mathbf{r}] + J_{cv}(\mathbf{K}_{exc}) \delta_M . \quad (\text{П1.19})$$

Правильная волновая функция возбужденного состояния кристалла должна представлять собой некоторую линейную комбинацию одновозбужденных детерминантов с определенным полным волновым вектором $\mathbf{K}_{exc} = const$. Представим ее в виде:

$$\Psi_{\mathbf{K}_{exc}}^{(M)} = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) \Phi_{c\mathbf{k}+\mathbf{K}_{exc}/2, v\mathbf{k}-\mathbf{K}_{exc}/2}^{(M)} , \quad (\text{П1.20})$$

подставим (П1.20) в уравнение $H_e \Psi_{\mathbf{K}_{exc}}^{(M)} = E_{exc} \Psi_{\mathbf{K}_{exc}}^{(M)}$, и умножим его на $\left\langle \Phi_{c\mathbf{k}+\mathbf{K}_{exc}/2, v\mathbf{k}-\mathbf{K}_{exc}/2}^{(M)} \right|$. Тогда из (П1.12) и (П1.19) следует система уравнений для определения коэффициентов $A(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} & \left[E_c(\mathbf{k} + \mathbf{K}_{exc}/2) - E_v(\mathbf{k} - \mathbf{K}_{exc}/2) - E_{exc} \right] A(\mathbf{k}) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}'} \left[- \int d\mathbf{r} \frac{e^2}{r} \exp[-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] + J_{cv}(\mathbf{K}_{exc}) \delta_M \right] A(\mathbf{k}') = 0 . \end{aligned} \quad (\text{П1.21})$$

Удобно перейти к Фурье образу $A(\mathbf{k})$:

$$F(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) . \quad (\text{П1.22})$$

Обозначим $E_{cv}(\mathbf{k}, \mathbf{K}_{exc}) = E_c(\mathbf{k} + \mathbf{K}_{exc}/2) - E_v(\mathbf{k} - \mathbf{K}_{exc}/2)$. Учитывая, что $F(0) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k})$, получим:

$$\begin{aligned} & \left[E_{cv}(\mathbf{k}, \mathbf{K}_{exc}) - E_{exc} \right] A(\mathbf{k}) - \\ & - \int d\mathbf{r} \frac{e^2}{r} F(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + J_{cv}(\mathbf{K}_{exc}) \delta_M F(0) = 0 . \end{aligned} \quad (\text{П1.23})$$

Из (П1.22) непосредственно следует

$$(-i\nabla) F(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) ,$$

следовательно, для произвольной функции $f(\mathbf{k})$ можно записать:

$$f(-i\nabla) F(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) ,$$

Тогда, в частности справедливо равенство

$$\left[E_{cv}(-i\nabla, \mathbf{K}_{exc}) - E_{exc} \right] F(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \left[E_{cv}(\mathbf{k}, \mathbf{K}_{exc}) - E_{exc} \right] A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{П1.24})$$

Домножим все на $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ и просуммируем по \mathbf{k} . Учитывая выше приведенные равенства получим, что из (П1.23) с учетом (П1.24) следует

$$\left[E_{cv}(-i\nabla, \mathbf{K}_{exc}) - \frac{e^2}{r} + J_{cv}(\mathbf{K}_{exc}) \delta_M \delta(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = E_{exc} F(\mathbf{r}). \quad (\text{П1.25})$$

Это уравнение эффективной массы для экситона. Функция $F(\mathbf{r})$ представляет собой функцию относительного движения в экситоне в методе эффективной массы, а $A(\mathbf{k})$ - Фурье образ этой функции. Из самой формы уравнения (П1.25) видно, что состояние внутреннего движения в экситоне может зависеть от движения его центра масс.

Из всего изложенного видно, что не ограничивая общности при $\mathbf{K}_{exc} = 0$ детерминантную волновую функцию $\Phi_{\mathbf{ck}+\mathbf{K}_{exc}/2, \mathbf{vk}-\mathbf{K}_{exc}/2}^{(M)}$ можно заменить на произведение одночастичных волновых функций электрона и дырки $\tilde{\varphi}_{\mathbf{ck}} \varphi_{\mathbf{vk}}$ в соответствующих зонах. Тогда полная волновая функция экситона может быть записана в виде:

$$\Psi^{(M)} = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{ck}}(\mathbf{r}_e) \varphi_{\mathbf{vk}}(\mathbf{r}_h) \quad (\text{П1.26a})$$

Или в координатном представлении:

$$\Psi^{(M)} = F_i(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{ek}}(\mathbf{r}_e) \varphi_{\mathbf{hk}}(\mathbf{r}_h) \quad (\text{П1.26б})$$

Рассмотрим несколько примеров:

Пример 1. Уравнение эффективной массы экситона в гексагональном кристалле

В гексагональном кристалле с группой симметрии C_{6v} зона проводимости простая, она имеет симметрию Γ_6 и дважды вырождена по спину. Валентная зона состоит из трех подзон с симметрией Γ_9 , Γ_7 и Γ_7 . Зоны Γ_7 отщеплены от зоны Γ_9 кристаллическим полем и спин орбитальным взаимодействием соответственно (**Рисунок П1.1**), все три зоны простые. Соответственно имеются три серии экситонов: $A(\Gamma_6 \times \Gamma_9)$, $B(\Gamma_6 \times \Gamma_7)$ и $C(\Gamma_6 \times \Gamma_7)$.

Для простых зон в приближении эффективной массы можно записать энергию электрона и дырки на дне зон как

$$E_c(\mathbf{k}) = E_{c0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{1}{m_{\alpha\beta}^e} k_{\alpha} k_{\beta} \equiv E_{c0} + \hat{H}_e(\mathbf{k}) \quad \text{и} \quad E_v(\mathbf{k}) = E_{v0} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{1}{m_{\alpha\beta}^h} k_{\alpha} k_{\beta} \equiv E_{v0} - \hat{H}_h(\mathbf{k}).$$

Тогда из уравнения (П1.25) непосредственно следует:

$$\left\{ \hat{H}_e \left(-i\nabla + \frac{1}{2} \mathbf{K}_{exc} \right) + \hat{H}_h \left(-i\nabla - \frac{1}{2} \mathbf{K}_{exc} \right) - \frac{e^2}{r} + J_{cv}(\mathbf{K}_{exc}) \delta_M \delta(\mathbf{r}) \right\} F(\mathbf{r}) = (E - E_g) F(\mathbf{r}). \quad (\text{П1.27})$$

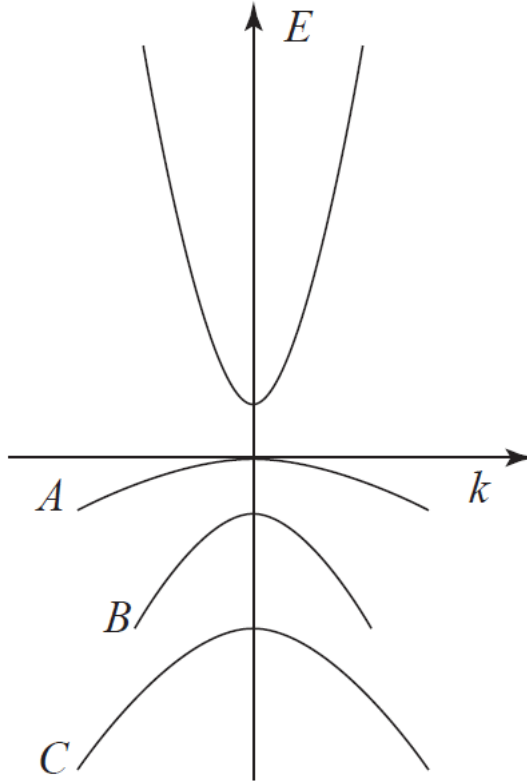


Рис П1.1. Схема зон в кристалле со структурой вюрцита вблизи Г точки.

Вообще говоря, движение центра масс экситона и относительное движение в экситоне в бесконечном гексагональном кристалле со структурой вюрцита разделяются. Экстремумы зон в таком кристалле не являются сферическими. В системе главных осей можно ввести координаты центра масс и относительно центра масс:

$$R_{\alpha} = \frac{(m_{e\alpha}^* r_{e\alpha} + m_{h\alpha}^* r_{h\alpha})}{M_{\alpha}} \quad \text{и} \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$$

$$\text{Где } M_{\alpha} = m_{e\alpha}^* + m_{h\alpha}^* \quad \alpha = x, y, z$$

Энергия экситона как целого в этом случае определяется выражением:

$$E_{exc}(\mathbf{K}) = E_G + \hbar^2 \sum_{\alpha} K_{\alpha}^2 / 2M_{\alpha} + \varepsilon_n \quad (\text{П1.28})$$

Где K_{α} - компоненты волнового вектора центра масс экситона, ε_n - собственные значения энергии внутреннего движения в экситоне. Для внутреннего движения имеем уравнение:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{\mu_{\alpha}} \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha}^2} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \right\} \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n \quad (\text{П1.29})$$

здесь $\frac{1}{\mu_\alpha} = \frac{1}{m_{e\alpha}^*} + \frac{1}{m_{h\alpha}^*}$ - приведенная масса экситона.

Уравнение (П1.29) для экситона с анизотропной массой, вообще говоря, точно аналитически не решается и приходится использовать различные приближения.

Дальнейшее упрощение можно получить для случая простых изотропных зон.

Пример 2. Простые изотропные зоны

$$E_c(\mathbf{k}) = E_{c0} + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_e^2 \equiv E_{c0} + \hat{H}_e(\mathbf{k}) \text{ и } E_v(\mathbf{k}) = E_{v0} + \frac{\hbar^2}{2m_h} k_h^2 \equiv E_{v0} + \hat{H}_h(\mathbf{k}). \quad (\text{П1.30})$$

Подставляя в (П1.27) получим уравнение:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2i} \left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_e^*} \right) \mathbf{K} \cdot \nabla \right] F(\mathbf{r}) = \left[E - E_g - \frac{1}{8\mu} \hbar^2 K^2 \right] F(\mathbf{r}). \quad (\text{П1.31})$$

Где $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$ - приведенная масса экситона, $-i\hbar\nabla$ - импульс относительного движения в экситоне, $i\nabla_e = i\nabla - \frac{1}{2}\mathbf{K}$, $i\nabla_h = i\nabla + \frac{1}{2}\mathbf{K}$, \mathbf{K} - волновой вектор центра масс.

Слагаемое с $\mathbf{K} \cdot \nabla$ можно исключить с помощью преобразования:

$$F(\mathbf{r}) = \exp(i\alpha\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \text{ где } \alpha = \frac{1}{2} \frac{m_e^* - m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \quad (\text{П1.32})$$

Это преобразование эквивалентно выбору системы координат в которой

$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, а начало координат совпадает с центром масс электрон-дырочной пары:

$$\mathbf{R} = \frac{m_e^* \mathbf{r}_e + m_h^* \mathbf{r}_h}{m_e^* + m_h^*}$$

Отсюда находим, что функция относительного движения в экситоне $f(\mathbf{r})$ должна удовлетворять уравнению:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right] f(\mathbf{r}) = \left[E - E_g - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_e^* + m_h^*)} \right] f(\mathbf{r}). \quad (\text{П1.33})$$

Пример 3. Уравнение эффективной массы экситона в кубическом кристалле

Гамильтониан экситона в кубическом кристалле с вырожденной валентной зоной (без учета спина) имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_c(-i\nabla_e) - \hat{H}_v(-i\nabla_h) - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}. \quad (\text{П1.34})$$