

Санкт Петербургский Государственный Университет
Физико-Технический Институт им. А.Ф. Иоффе РАН

**Магнитооптические явления в полупроводниках и
полупроводниковых наноструктурах**

Учебное пособие

Кочерешко В.П., Серов А.Ю.

Издательство Санкт Петербургского Университета

Оглавление

Предисловие	2
Введение	3
1. Электромагнитные волны в кристаллах	5
2. Тензор диэлектрической проницаемости. Общие свойства	11
3. Частотная дисперсия и двойное лучепреломление	12
4. Гиротропия. Естественная оптическая активность	18
5. Влияние магнитного поля	23
5.1. <i>Линейные по магнитному полю эффекты.</i>	
<i>Круговое магнитное двупреломление (Эффект Фарадея)</i>	25
5.2. <i>Квадратичное двупреломление (Эффект Фогта)</i>	27
5.3. <i>Эффект Зеемана для экситона</i>	28
5.4. <i>Магнитооптический эффект Керра</i>	32
6. Эффекты квадратичной пространственной дисперсии	36
7. Билинейные по магнитному полю и волновому вектору слагаемые	38
7.1. <i>Эффект инверсии магнитного поля</i>	39
7.2. <i>Эффект невязимного магнито-индуцированного двулучепреломления в гексагональных кристаллах</i>	40
7.3. <i>Эффект невязимного магнито-индуцированного двулучепреломления в кубических кристаллах</i>	44
7.4. <i>Эффект четности в оптических спектрах экситонов в квантовых ямах</i>	45
8. Поправки к эффектам Фарадея и Фогта связанные с пространственной дисперсией	48
9 Заключение	50
Приложение 1 Механический экситон	51
Примеры	56
Приложение 2 Экситонный вклад в тензор диэлектрической проницаемости	62
Литература	66

Предисловие

Книга написана на основе лекций, которые авторы читают уже много лет на кафедре Физики Твердого Тела в Санкт Петербургском Государственном Университете. В ней предпринята попытка комплексного и последовательного описания различных магнитооптических явлений, в основном связанных с экситонами. Рассмотрены как классические, давно известные магнитооптические эффекты, так и новые, обнаруженные совсем недавно.

Когда исследование сталкивается с затруднениями, часто возникает необходимость "все зачеркнуть" и начать сначала. Поэтому очень важно понимать, откуда что берется. Идея этой книги - по возможности вести изложение "от Адама", так чтобы пытливый исследователь мог все изложенное подтвердить или опровергнуть. Особенно важно такое понимание для начинающих исследователей. Только так можно найти что-то действительно новое или понять непонятое старое.

Еще Фарадей верил в то, что можно «намагнитить» свет. Оказалось, что можно не только «намагнитить» свет магнитным полем, но и с помощью света создать квазистационарное магнитное поле. Более того, оказывается, что светом можно заставить двигаться экситоны и электроны. Обо всем этом можно прочитать в настоящей книге.

Авторы благодарят Л.Е.Голуба и В.Ф.Агеяна за внимательное прочтение и полезные замечания.

Введение

Разнообразие явлений природы неисчерпаемо. Не существует такой области знаний, в которой все известно и давно исследовано. В любой области можно найти что-то новое, не замеченное более ранними исследователями. Часто возникает потребность, не вдаваясь в детали проанализировать возможность наблюдения того или иного явления, а иногда и попытаться понять, действительно ли мы наблюдаем явление природы или это ошибка эксперимента.

Для этого часто оказывается полезным феноменологическое описание электромагнитных явлений. Такое описание плодотворно для ответа на вопросы:

- Какие явления можно ожидать в той или иной конкретной геометрии эксперимента?
- Каких явлений вообще быть не может?
- Какова симметрия тех или иных явлений?

Проблема состоит в том, что как правило, при феноменологическом описании не удается оценить величины ожидаемых явлений. Для этого необходим микроскопический подход. В данной книге мы будем рассматривать различные оптические и магнитооптические явления в кристаллах различной симметрии в разнообразных наноструктурах. Главным инструментом этих исследований будет тензор диэлектрической проницаемости.

Тензор диэлектрической проницаемости устанавливает линейную связь между электрической индукцией и электрическим полем:

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}). \quad (\text{B1})$$

Линейность соотношения (B1) предполагает справедливость и обратного соотношения:

$$E_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D_j(\omega, \mathbf{k}). \quad (\text{B2})$$

Формулы (B1, B2) означают, что электрическое поле вызывает индукцию, пропорциональную этому полю. При приложении достаточно слабых внешних статических полей (электрического \mathbf{E}^0 , магнитного \mathbf{H}^0 или поля деформаций) тензор диэлектрической проницаемости можно разложить по степеням этих полей. Например:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}, \mathbf{E}) = & \varepsilon_{ij}^0(\omega) + i\gamma_{ij}(\omega)k_l + A_{ij}^{(1)}(\omega)H_l^0 + B_{ij}^{(1)}(\omega)E_l^0 + \\ & + A_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_k^0k_l + B_{ijkl}^{(2)}(\omega)E_k^0k_l + C_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_k^0H_l^0 + D_{ijkl}^{(2)}(\omega)E_k^0E_l^0 + \dots \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

Из этого разложения видно, что линейная связь имеется не только между индукцией $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ и электромагнитным полем $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ при фиксированных статических полях \mathbf{E}^0 и \mathbf{H}^0 , но также существует линейная связь между индукцией $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$, и статическими полями \mathbf{E}^0 , \mathbf{H}^0 и их отдельными компонентами, а также между различными комбинациями произведений этих компонент при фиксированном поле $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$. Статические поля в (B3) \mathbf{E}^0 и \mathbf{H}^0 оказываются, в опрежденном смысле, равноправными с полями $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ и $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$.

Отдельные слагаемые в (B2), (B3) можно трактовать как изменение величины и поляризации электромагнитной волны под действием внешних статических полей, но можно их трактовать и как возникновение дополнительных квазистатических полей при изменении состояния поляризации или величины электромагнитного поля $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$.

Например, четвертое слагаемое в (B3), описывающее эффект Поккельса означает изменение поляризации проходящего света под действием электрического поля. Эффект обратный эффекту Поккельса состоит в возникновении статического (квазистатического)

электрического поля при прохождении через кристалл поляризованного света. Это одна из разновидностей многообразных фотогальванических и фотовольтаических эффектов.

Описание эффекта обратного эффекту Фарадея, (третье слагаемое в (B2), (B3)) звучат так: «возникновение магнитного поля (намагниченности) при прохождении через среду циркулярно поляризованной электромагнитной волны».

Часто бывает удобно установить независимые компоненты тензоров, входящих в разложение (B3). Это не трудно сделать, рассматривая преобразование этих тензоров под действием операций симметрии кристалла, если иметь в виду что тензор диэлектрической проницаемости связывает компоненты индукции и электрического поля (B1).

Очевидно, что правая и левая части этого уравнения должны преобразовываться при операциях симметрии кристалла одинаковым образом. В левой части стоит вектор, следовательно, правая часть равенства также должна преобразовываться как вектор.

$D_i(\omega, \mathbf{k})$ - это компоненты вектора, следовательно $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})E_j(\omega, \mathbf{k})$ также должны преобразовываться при преобразованиях группы симметрии кристалла как компоненты вектора (B4).

Таким образом, произведения различных компонент волнового вектора k_m , магнитного поля H_k , электрического поля E_l , поля напряжений u_{mn} и т.д. вместе с электромагнитным полем $E_j(\omega, k)$ должны образовывать вектор.

Анализ свойств тензора диэлектрической проницаемости позволяет не только классифицировать известные явления, но и предсказывать новые, еще не известные.

1. Электромагнитные волны в кристаллах

Вначале кратко напомним некоторые общие сведения, об электромагнетизме. Электромагнитные явления описываются уравнениями Максвелла. Эти уравнения представляют собой «концентрированное» выражение экспериментальных фактов.

Так закон индукции Фарадея гласит: «изменение магнитного поля \mathbf{B} приводит к возникновению вихревого электрического поля \mathbf{E} ». Символически, это можно записать так:

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (1.1)$$

Здесь c пока что просто коэффициент пропорциональности.

Закон Кулона «Источником электрического поля являются электрические заряды» приводит к уравнению:

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (1.2)$$

Здесь ρ - плотность заряда.

Еще один экспериментальный факт состоит в том, что «Протекающий электрический ток приводит к возникновению вихревого магнитного поля». Это утверждение известно как закон Эрстеда и может быть записано таким образом:

$$\operatorname{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}.$$

В это уравнение следует добавить еще одно слагаемое, так называемый «ток смещения»:

$$\operatorname{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (1.3)$$

Появление тока смещения в (1.3) обусловлено требованием непрерывности потока зарядов:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{J} = 0.$$

Закон отсутствия магнитных зарядов приводит к соотношению:

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0. \quad (1.4)$$

Комбинируя (1.1) и (1.3), получим волновое уравнение $\left(\Delta + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\mathbf{E} = 0$, из которого видно,

что коэффициент пропорциональности c является скоростью распространения волны, в данном случае электромагнитной. Источниками электромагнитного поля являются заряды и вызванные движением зарядов токи. В единице объема материальной среды имеется $\sim 10^{23}$ зарядов ρ_i и молекулярных токов j_i . Следовательно, для описания свойств среды необходимы как минимум $\sim 10^{23}$ уравнений. Очевидно, что для использования уравнений электромагнитного поля надо сократить их число. Для этого необходимо произвести усреднение микроскопических уравнений по физически бесконечно малому объему и физически бесконечно малому интервалу

времени. С этой целью определим усредненные поля \mathbf{E} и \mathbf{B} , а также усредненные заряды ρ и токи \mathbf{J} .

$$\rho + \rho_0 = \langle \rho_i \rangle ; \mathbf{J} + \mathbf{J}_0 = \langle \mathbf{j}_i \rangle ; \mathbf{E} = \langle \mathbf{E}_i \rangle ; \mathbf{B} = \langle \mathbf{B}_i \rangle, \quad (1.5)$$

Здесь выделены внешние ρ , \mathbf{J} и внутренние ρ_0 , \mathbf{J}_0 заряды и токи. В результате, для этих величин получим систему уравнений Максвелла в среде:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} (\mathbf{J} + \mathbf{J}_0), \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi (\rho + \rho_0), \\ \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Для того, чтобы исключить внутренние токи и заряды, определим новые поля \mathbf{D} и \mathbf{H} так, чтобы для них, по возможности, получились уравнения похожие на уравнения Максвелла в пустоте. Эти новые поля называются *вектором электрической индукции* $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$ и *вектором напряженности магнитного поля* $\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}$. (Логичнее напряженностью магнитного поля было бы называть вектор \mathbf{B} , так как именно он является аналогом вектора \mathbf{E} . Однако по историческим причинам сложились такие названия. Вектор \mathbf{B} называют вектором индукции поля, а вектор \mathbf{H} вектором напряженности). Здесь \mathbf{P} - поляризуемость и \mathbf{M} - намагниченность связаны с внутренними зарядами и токами ρ_0 и \mathbf{J}_0 . Определим \mathbf{P} и \mathbf{M} следующим образом:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{P} &= -\rho_0, \\ \mathbf{J}_0 &= \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + c \cdot \operatorname{rot} \mathbf{M}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

В результате для системы полей $BEHD$ получим систему уравнений, по форме совпадающую с уравнениями Максвелла в вакууме.

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}, \\ \operatorname{div} \mathbf{D} &= 4\pi \rho, \\ \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Как следует из (1.6) и (1.7) для полного описания электромагнитных свойств материальной среды эту систему следует дополнить материальными уравнениями устанавливающими связь между полями \mathbf{D} и \mathbf{E} , а также \mathbf{B} и \mathbf{H} . С этой целью определим тензоры диэлектрической и магнитной проницаемости с помощью соотношений:

$$\begin{aligned} D_i &= \varepsilon_{ij} E_j, \\ B_i &= \mu_{ij} H_j. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Следует заметить, что эта система переопределена. В действительности для описания всех свойств среды, как электрических, так и магнитных, достаточно одного только тензора диэлектрической проницаемости. Введение тензора магнитной проницаемости - это вопрос удобства, он полезен только при описании специфических свойств магнитных сред.

По определению, $\varepsilon_{ij}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ является функцией линейного отклика на δ образное внешнее воздействие:

$$D_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int dr' \varepsilon_{ij}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t') . \quad (1.10)$$

Так как отклик следует за причиной, а не наоборот, то интегрировать следует от $-\infty$ до t . Для однородной в пространстве и времени среды, произведя преобразование Фурье, получим:

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}) . \quad (1.11)$$

Иногда бывает удобнее пользоваться обратным тензором диэлектрической проницаемости:

$$E_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D_j(\omega, \mathbf{k}) . \quad (1.12)$$

Поляризуемость связана с электрическим полем $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ через тензор восприимчивости $\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. По определению

$$P_j(\omega, \mathbf{k}) = \chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_i(\omega, \mathbf{k}) \text{ или } \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) ,$$

где δ_{ij} - единичный тензор.

Важнейшую роль в описании оптических спектров кристаллов играют «нормальные электромагнитные волны». Нормальные электромагнитные волны - это плоские монохроматические волны, характеризующиеся определенными значениями частоты ω и волнового вектора \mathbf{k} . Такие волны имеют вид

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} , \quad \mathbf{B} = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} , \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} , \quad \mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s} , \quad (1.13)$$

Где \mathbf{E}_0 - амплитуда, $\tilde{n}(\omega, \mathbf{s})$ - комплексный показатель преломления, $\tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) = n(\omega, \mathbf{s}) + i\kappa(\omega, \mathbf{s})$, $n(\omega, \mathbf{s})$ - вещественная часть показателя преломления, $\kappa(\omega, \mathbf{s})$ - коэффициент поглощения света, $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$ - единичный вектор в направлении распространения волны.

Для нормальных волн из уравнений Максвелла непосредственно следует:

$$\mathbf{D} = -\frac{c}{\omega} [\mathbf{k} \times \mathbf{B}] ; \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = 0 ; \quad \mathbf{B} = \frac{c}{\omega} [\mathbf{k} \times \mathbf{E}] ; \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{B} = 0 . \quad (1.14)$$

Отсюда видно, что векторы \mathbf{k} , \mathbf{D} , \mathbf{B} взаимно перпендикулярны. Заметим, что поле \mathbf{D} , в отличие от поля \mathbf{E} , всегда поперечно, именно оно является аналогом поля \mathbf{E} в вакууме.

Важной характеристикой электромагнитной волны в кристаллах является поток энергии, задаваемый вектором Пойнтинга:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \times \mathbf{B}] = \frac{c}{4\pi} \tilde{n}(\omega, \mathbf{k}) \{ \mathbf{s} E^2(\omega, \mathbf{s}) - \mathbf{E}(\omega, \mathbf{s}) (\mathbf{E}(\omega, \mathbf{s}) \cdot \mathbf{s}) \}. \quad (1.15)$$

Так как в анизотропной среде вектор \mathbf{E} не перпендикулярен вектору \mathbf{k} , то направления потока энергии \mathbf{S} и фазовой скорости волны, вообще говоря, не совпадают.

Нормальные электромагнитные волны, распространяющиеся в данной среде, полностью характеризуют электромагнитные свойства этой среды. Подставив (1.13) в уравнения Максвелла (1.8) легко увидеть, что нормальные электромагнитные волны удовлетворяют уравнению

$$\mathbf{D} = \frac{c^2}{\omega^2} \{ k^2 \mathbf{E} - \mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) \}. \quad (1.16)$$

Это равенство отражает тот факт, что поле \mathbf{D} совпадает по направлению с поперечной частью полного поля \mathbf{E} . Продольная же компонента поля \mathbf{E} равна $\mathbf{s} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{E})$. С другой стороны:

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}). \quad (1.17)$$

Из (1.16) и (1.17) следует уравнение

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - k^2 \delta_{ij} + k_i k_j \right) E_j(\omega, \mathbf{k}) = 0. \quad (1.18)$$

Эта система уравнений определяет те нормальные волны, которые могут распространяться в данной среде. Система (1.18) имеет ненулевое решение при условии, что:

$$\text{Det} \left| \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - k^2 \delta_{ij} + k_i k_j \right| = 0, \quad (1.19)$$

или

$$\text{Det} \left| \tilde{n}^2 (\delta_{ij} - s_i s_j) - \varepsilon_{ij} \left(\omega, \mathbf{s} \frac{\omega}{c} \tilde{n} \right) \right| = 0. \quad (1.20)$$

Это основное уравнение кристаллооптики (уравнение Френеля), оно описывает закон дисперсии для нормальных электромагнитных волн $\omega_i = \omega_i(\mathbf{k})$. Определяя из (1.20) показатели преломления для всех нормальных волн $\tilde{n}_i = \tilde{n}_i(\omega)$ можем найти сами нормальные волны,

$E_{0i} e^{i \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}_i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r} - \omega t \right)}$ и установить их поляризацию. Далее используя граничные условия Максвелла и, если требуется, дополнительные граничные условия* для нормальных волн, мы можем рассчитать различные оптические свойства кристаллов.

*дополнительные граничные условия. При учете пространственной дисперсии одних граничных условий Максвелла может оказаться недостаточно. Например, если дисперсионное уравнение (1.20) имеет порядок выше второго по \tilde{n}^2 , для решения задачи об отражении и пропускании света необходимо использовать дополнительные граничные условия.

Добавлено примечание ([VK1]):

Для обратного тензора $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ также можно написать дисперсионное уравнение:

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} \delta_{ij} - k^2 \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) + k_i k_j \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) \right) D_j(\omega, \mathbf{k}) = 0 ,$$

$$\text{Det} \left| \frac{\omega^2}{c^2} \delta_{ij} - k^2 \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) + k_i k_j \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) \right| = 0 . \quad (1.21)$$

В одних случаях, удобнее пользоваться уравнением (1.19), а в других уравнением (1.21). Обратный тензор $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ удобен, например, вблизи полюсов тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

Феноменологическое рассмотрение оптических явлений в материальных средах с помощью тензора диэлектрической проницаемости часто бывает очень полезным. Как следует из уравнений Максвелла, все свойства среды (может быть только за исключением механических) «спрятаны» в тензоре диэлектрической проницаемости. Отражение и поглощение света, люминесценция, рамановское рассеяние и даже проводимость кристаллов описываются тензором диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{K})$. Конечно, тензор диэлектрической проницаемости, в основном, годится для описания свойств макроскопических объектов, размеры которых намного больше длины волны света и не годится для описания свойств нанообъектов. Однако, очевидно, что им можно пользоваться для анализа усредненных свойств массивов нанообъектов. Кроме того, даже одиночные нанообъекты часто находятся в объемной матрице, и тензором диэлектрической проницаемости уже можно пользоваться для описания свойств такой структуры в целом.

С помощью тензора диэлектрической проницаемости можно установить, какие явления могут иметь место в той или иной геометрии эксперимента. Можно даже качественно оценить соотношение между величинами явлений в разных геометриях. Однако для вычисления самих этих величин, разумеется, необходимо микроскопическое рассмотрение.

Из формулы (1.16) видно, что иногда бывает удобно воспользоваться поперечным тензором диэлектрической проницаемости, связывающем поперечные компоненты полей \mathbf{D} и \mathbf{E} . Так как поле \mathbf{D} всегда поперечно, из полного поля \mathbf{E} следует вычесть его продольную составляющую и найти связь между \mathbf{D} и \mathbf{E}_\perp . Определим поперечный тензор диэлектрической проницаемости следующим образом:

$$D_i = \varepsilon_{ij} E_j = \varepsilon_{ij} E_{\parallel,j} + \varepsilon_{ij} E_{\perp,j} = \varepsilon_{\perp,ij} E_{\perp,j} . \quad (1.22)$$

Из свойства поперечности вектора \mathbf{D} : ($\mathbf{s} \cdot \mathbf{D} = 0$) следует, что

$$s_i D_i = \varepsilon_{ij} s_i E_j = \varepsilon_{ij} s_i E_{\parallel,j} + \varepsilon_{ij} s_i E_{\perp,j} = 0 . \quad (1.23)$$

Разделим поле \mathbf{E} на поперечную и продольную компоненты:

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{E}_\perp = 0 \quad \mathbf{E}_\parallel = E_\parallel \mathbf{s} \quad (1.24)$$

Отсюда получаем:

$$E_{\parallel,i} = - \frac{\varepsilon_{ij} s_j E_{\perp,j}}{\varepsilon_{ii} s_i s_i} s_i \quad (1.25)$$

Поперечный тензор диэлектрической проницаемости выражается через полный тензор диэлектрической проницаемости следующим образом:

$$\varepsilon_{\perp,ij} = \left(\varepsilon_{ij} - \frac{\varepsilon_{ii}\varepsilon_{jj}s_i s_j}{\varepsilon_{ii}s_i s_i} \right) \quad (1.26)$$

Здесь везде предполагается суммирование по повторяющимся индексам, что было предложено еще Эйнштейном. Поперечный диэлектрический тензор нам еще пригодится в **главе 7**. Однако, обычно проще пользоваться полным тензором диэлектрической проницаемости.

2. Тензор диэлектрической проницаемости. Общие свойства.

Тензор диэлектрической проницаемости может зависеть от частоты ω , волнового вектора света \mathbf{k} и от внешних полей: электрического, магнитного и механических напряжений. Мы будем рассматривать зависимость $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H})$ только от волнового вектора и внешнего магнитного поля.

Рассмотрим сначала некоторые общие свойства тензора диэлектрической проницаемости. Принцип симметрии кинетических коэффициентов [1, 2] требует, чтобы:

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) = \varepsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k}, -\mathbf{H}) . \quad (2.1)$$

Однако

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) &\neq \varepsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k}, \mathbf{H}) , \\ \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) &\neq \varepsilon_{ji}(\omega, \mathbf{k}, -\mathbf{H}) . \end{aligned} \quad (2.2)$$

Для слабого магнитного поля \mathbf{H} и малых волновых векторов \mathbf{k} можно разложить тензор диэлектрической проницаемости по степеням \mathbf{k} и \mathbf{H} :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) &= \varepsilon_{ij}^0(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega)k_l + A_{ijl}^{(1)}(\omega)H_l + \\ &+ A_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_k H_l + B_{ijkl}^{(2)}(\omega)k_k k_l + C_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_k k_l + \\ &+ C_{ijklm}^{(3)}(\omega)k_k H_l H_m + C_{ijklm}^{(3)}(\omega)k_k k_l H_m + C_{ijklmn}^{(4)}(\omega)k_k k_l H_m H_n + \dots \end{aligned} \quad (2.3)$$

Для обратного тензора диэлектрической проницаемости справедливо аналогичное разложение:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) &= \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega) + i\delta_{ijl}(\omega)k_l + \tilde{A}_{ijl}^{(1)}(\omega)H_l + \\ &+ \tilde{A}_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_k H_l + \tilde{B}_{ijkl}^{(2)}(\omega)k_k k_l + \tilde{C}_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_k k_l + \\ &+ \tilde{C}_{ijklm}^{(3)}(\omega)k_k H_l H_m + \tilde{C}_{ijklm}^{(3)}(\omega)k_k k_l H_m + \tilde{C}_{ijklmn}^{(4)}(\omega)k_k k_l H_m H_n + \dots \end{aligned} \quad (2.4)$$

Все рассматриваемые здесь оптические явления могут наблюдаться в широкой области спектра от радиочастот до рентгеновского диапазона, но наиболее ярко они проявляются вблизи резонансных частот в кристаллах. Вблизи резонансных частот экситонов все оптические явления усиливаются, поэтому мы будем рассматривать свойства тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H})$ в этой области. Это несколько не нарушает общности нашего рассмотрения, все полученные результаты справедливы и вдали от резонансных частот в кристалле.

Тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H})$ устанавливает связь между индукцией \mathbf{D} , полем \mathbf{E} , и статическим внешним полем \mathbf{H} . Как уже отмечалось, все рассматриваемые в дальнейшем эффекты могут иметь обратные эффекты. Так, например, эффект Фарадея можно сформулировать как «возникновение круговой поляризации у распространяющегося в среде света, под действием магнитного поля». Тогда обратный эффект Фарадея будет выглядеть как «возникновение намагнитченности среды под действием циркулярно поляризованного света». Некоторые из обратных эффектов уже обнаружены, но многие другие еще ждут своего часа.

Рассмотрим детально все члены разложения тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в (2.3).

3. Частотная дисперсия и двойное лучепреломление

Первое слагаемое в (2.3) - тензор $\varepsilon_{ij}^0(\omega)$ - описывает явления частотной дисперсии и двойного лучепреломления. Частотная дисперсия - это зависимость тензора $\varepsilon_{ij}^0(\omega)$ от частоты. Конкретный вид частотной зависимости диэлектрической проницаемости можно получить только из микроскопических квантовомеханических расчетов. Можно записать самый общий вид функции диэлектрического отклика, каковой является диэлектрическая проницаемость, в виде

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi \frac{e^2}{m} \sum_l \frac{f_l}{\omega_l^2 - \omega^2 + 2i\omega_l\Gamma_l}, \quad (3.1)$$

где: ω_l - частоты различных резонансов в среде, f_l - силы осциллятора этих резонансов, Γ_l - константы затухания.

Приблизительный, качественный ход вещественной части показателя преломления как функции частоты представлен на **рисунке 3.1**.

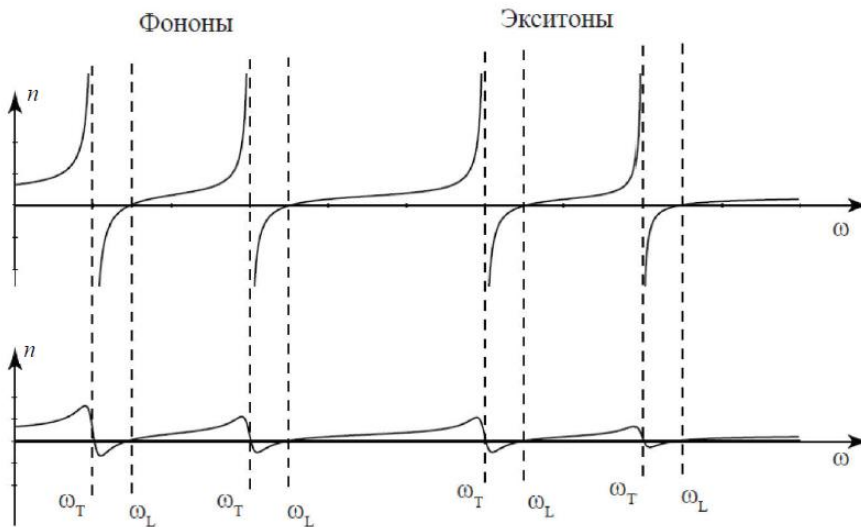


Рис 3.1 Качественная зависимость вещественной части показателя преломления n от частоты ω в широкой спектральной области. Вблизи каждого из резонансов: ω_T - резонансная частота; ω_L - продольная частота, определяется условием $\varepsilon(\omega_L) = 0$. а) без учета затухания, б) с учетом затухания.

Видно, что, во-первых, показатель преломления в целом падает с ростом частоты, во-вторых, в кристалле имеется целый ряд резонансных частот. Действительно, на низких частотах в электромагнитный отклик кристалла могут вносить вклад все резонансы, связанные с

ориентацией молекул, с колебаниями атомов и с различными электронными возбуждениями. Однако на высоких частотах вклад низкочастотных колебаний падает, и в показатель преломления вносят вклад только «быстрые» процессы, связанные с экситонными и более высокими по энергии возбуждениями.

Для нормальных волн в кристаллах было получено (1.16):

$$\mathbf{D} = \tilde{n}^2(\omega) \{ \mathbf{E}(\omega, \mathbf{s}) - \mathbf{s}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{E}(\omega, \mathbf{s})) \} , \quad (3.2)$$

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{s} = 0 ,$$

Или в компонентах:

$$\varepsilon_{ij}(\omega) E_j(\omega, \mathbf{s}) = \tilde{n}^2(\omega) \{ E_i(\omega, \mathbf{s}) - s_i s_j E_j(\omega, \mathbf{s}) \} . \quad (3.3)$$

Дисперсионное уравнение получается как условие разрешимости этого уравнения. Если известен тензор диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{ij}(\omega)$, то можно найти комплексный показатель преломления и все нормальные волны в данном кристалле. Дисперсионное уравнение удобно рассматривать в главных осях тензора $\varepsilon_{ij}(\omega)$.

Для кристаллов разной симметрии тензор $\varepsilon_{ij}(\omega)$ в главных осях выглядит следующим образом:

Система	Главные оси	Тензор
Триклинная	Не фиксированы	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$
Моноклинная	Ось y направлена по оси второго порядка или перпендикулярно плоскости симметрии	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & \varepsilon_{13} \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ \varepsilon_{13} & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$
Ромбическая	Оси x, y, z направлены по осям 2 го порядка, а в классе C_{2v} оси x, y перпендикулярны плоскости симметрии	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$
Тетрагональная	В классах C_4, S_4 и C_{4h} фиксирована только ось z (4 порядка). В классах D_4, C_{4v}, D_{2d} и D_{4h} фиксированы все оси	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$
Тригональная	В классах C_3 и C_{3i} фиксирована только ось z (третьего порядка). В классах D_3, C_{3v} и D_{3d} фиксированы все оси	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$
Гексагональная	В классах C_6, C_{3h} и C_{6h} фиксирована только ось z (6 порядка)	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$
Кубическая	Фиксированы все оси (оси x, y, z - оси второго порядка в классах T и T_h и оси 4 го порядка в классах O, T_d и O_h)	$\begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$
Изотропная среда	Выбор осей произволен	$\begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$

Непосредственно из уравнения (3.3) в главных осях $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}$ получаем дисперсионное уравнение:

$$\tilde{n}^2 (\varepsilon_{xx} \tilde{n}_x^2 + \varepsilon_{yy} \tilde{n}_y^2 + \varepsilon_{zz} \tilde{n}_z^2) - \left[\tilde{n}_x^2 \varepsilon_{xx} (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \tilde{n}_y^2 \varepsilon_{yy} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) + \tilde{n}_z^2 \varepsilon_{zz} (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}) \right] + \varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy} \varepsilon_{zz} = 0, \quad (3.4)$$

где: $\tilde{n}_x, \tilde{n}_y, \tilde{n}_z$ компоненты показателя преломления в осях x, y, z .

Это уравнение называется *уравнением Френеля*, оно определяет в главных осях тензора некую поверхность – «*поверхность волновых векторов*». Дисперсионное уравнение для обратного диэлектрического тензора (1.21) допускает простую интерпретацию. Построим в координатах главных осей тензора диэлектрической проницаемости поверхность, которая определяется уравнением:

$$\varepsilon_{ij}^{-1} x_i x_j = \frac{x^2}{\varepsilon_{xx}} + \frac{y^2}{\varepsilon_{yy}} + \frac{z^2}{\varepsilon_{zz}} = 1 . \quad (3.5)$$

Поверхность волновых векторов в кристалле представляет собой эллипсоид. Если пересечь эллипсоид плоскостью, проходящей через его центр перпендикулярно к заданному направлению распространения волны, то сечением эллипсоида плоскостью будет эллипс. Длина его главных осей определяет значение показателя преломления, а направления осей определяют направления вектора \mathbf{D} (Рисунок 3.2) .

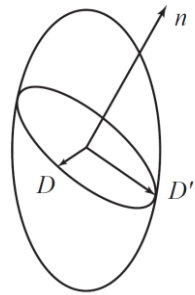


Рис 3.2. Эллипсоид волновых векторов (3.5) в кристалле произвольной симметрии. Вектор n указывает направления распространения волны.

Пример: *Двулучепреломление* [9].

Для кубических кристаллов все главные значения тензора $\varepsilon_{ij}(\omega)$ одинаковы, и кубический кристалл (в отсутствие пространственной дисперсии) ведет себя так же как изотропная среда.

Для одноосных кристаллов можно выбрать главные оси так, чтобы $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\perp}$ и $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\parallel}$. В таких кристаллах имеются две независимых компоненты диэлектрического тензора. К одноосным относятся кристаллы тетрагональной, тригональной, гексагональной систем.

В одноосном кристалле уравнение Френеля принимает вид:

$$\tilde{n}^2 (\tilde{n}^2 - \varepsilon_{\perp}) \left[\varepsilon_{\parallel} \tilde{n}^2 s_z^2 + \varepsilon_{\perp} \tilde{n}^2 (s_x^2 + s_y^2) - \varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp} \right] = 0 . \quad (3.6)$$

Первый корень (3.6) равен:

$$\tilde{n}_1^2 = \varepsilon_{\perp} ,$$

второй корень приводит к уравнению

$$\frac{\tilde{n}^2 s_z^2}{\epsilon_{\perp}} + \frac{\tilde{n}^2 (s_x^2 + s_y^2)}{\epsilon_{\parallel}} = 1, \quad (3.7a)$$

где ϵ_{\perp} и ϵ_{\parallel} главные значения тензора диэлектрической проницаемости.

Это значит, что поверхность волновых векторов распадается на две отдельные поверхности – сферу и эллипсоид вращения. Сферическая поверхность соответствует независимости волнового вектора от направления. Это направление называется направлением *обыкновенной волны*, для которой кристалл похож на изотропное тело с показателем преломления \tilde{n}_1^2 . Волна, соответствующая эллипсоиду, называется *необыкновенной*, ее показатель преломления

$$\tilde{n}_2^2 = \frac{\epsilon_{\parallel} \epsilon_{\perp}}{\epsilon_{\parallel} s_z^2 + \epsilon_{\perp} (s_x^2 + s_y^2)}. \quad (3.7b)$$

Для этой волны величина волнового вектора зависит от угла наклона волнового вектора к оптической оси кристалла z .

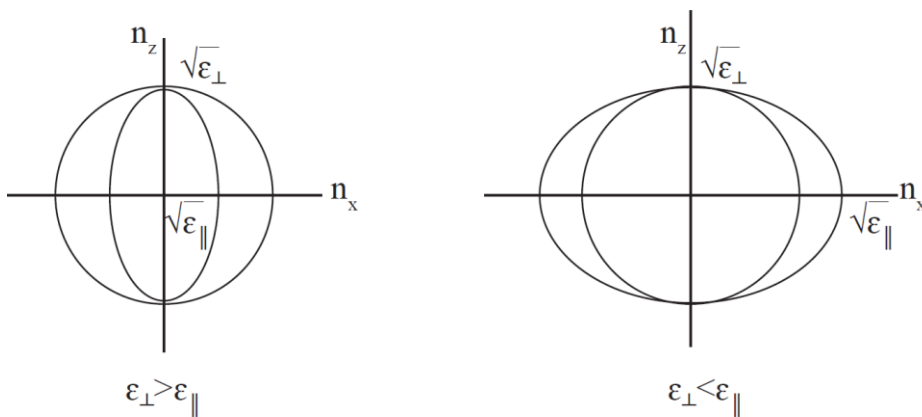


Рис 3.3. Поверхность волновых векторов в одноосном кристалле (3.7) получается при сечении эллипсоида волновых векторов (Рис.3.2) плоскостью.

Вектор \mathbf{D} всегда ортогонален волновому вектору и в обыкновенной и в необыкновенной волне. Вектор \mathbf{E} в обыкновенной волне перпендикулярен волновому вектору \mathbf{k} . В необыкновенной волне вектор \mathbf{E} имеет как поперечную, так и продольную компоненту.

Для поперечных волн:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \tilde{n}^2 \mathbf{E}, \quad \mathbf{s} \cdot \mathbf{E} = 0, \\ \mathbf{s} \cdot \mathbf{D} &= 0, \quad D_i = \epsilon_{ij} E_j. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Условие $\mathbf{s} \cdot \mathbf{E} = 0$ является определением поперечной волны, остальные равенства в (3.8) являются следствием этого. Для поперечной волны векторы \mathbf{E} и \mathbf{D} параллельны друг другу. В анизотропной среде это случается редко, отыскание поперечных волн эквивалентно нахождению собственных векторов матрицы ε_{ij} .

Для продольных волн:

$\mathbf{E} = E \cdot \mathbf{s}$, отсюда $\mathbf{D} = 0$ и $\mathbf{V} = 0$, следовательно $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = 0$. Это является необходимым условием для продольной волны.

В кристалле произвольной симметрии продольные, и поперечные волны могут распространяться только в исключительных направлениях. В кубическом кристалле, когда $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z$ продольные волны могут распространяться в любом направлении, если $\varepsilon(\omega) = 0$. Но в ромбоэдрических кристаллах, где $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y \neq \varepsilon_z$ они могут существовать только в случае равенства нулю одного из значений $\varepsilon_i(\omega)$.

Для двуосных кристаллов все три компоненты тензора диэлектрической проницаемости в главных осях различны по величине. Это заметно усложняет картину распространения волн в таких кристаллах.

Вблизи экситонных резонансов явление двупреломления может быть связано с тем, что резонансные частоты экситонов ω_i и/или дипольные матричные элементы экситонных переходов d_i зависят от направления распространения волны в кристалле.

Помимо двулучепреломления в оптике может наблюдаться и явление дихроизма. Если двулучепреломление связано с различием вещественных частей показателя преломления для разных направлений, то дихроизм связан с различием его мнимых частей. Хорошо известный пример проявления линейного дихроизма - это пленочный поляризатор, в котором одна из поляризаций сильно поглощается, а другая относительно свободно проходит через среду. Встречается и циркулярный дихроизм.

4. Гиротропия. Естественная оптическая активность

Гиротропией (естественной оптической активностью) называют явление вращения плоскости поляризации линейно поляризованного света [10]. Оно описывается слагаемым $i\gamma_{ijl}(\omega)k_l$ в (2.3). Следует отметить, что тензор γ_{ijl} не равен нулю только в кристаллах (и гетероструктурах) у которых отсутствует центр инверсии. Однако, это не является достаточным условием (например, гиротропия отсутствует в кристаллах с симметрией T_d не имеющих центра инверсии). Отсутствие центра инверсии может быть вызвано как кристаллической структурой (*bulk inversion asymmetry*), так и асимметрией самой структуры (*structure inversion asymmetry*). В координатном представлении можно записать:

$$D_i(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_{ij}^{(0)} E_j(\mathbf{r}, t) + \gamma_{ijl} \frac{\partial E_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_l} . \quad (4.1)$$

Из условий симметрии тензора ε_{ij} (2.1) и (2.2) следует, что $\gamma_{ijl} = -\gamma_{jil}$, следовательно

$$\begin{aligned} \gamma_{xzl} &= \gamma_{yzl} = \gamma_{zxl} = 0 , \\ \gamma_{xyl} &= -\gamma_{yxl} ; \gamma_{yzl} = -\gamma_{zyl} \quad \gamma_{zxl} = -\gamma_{xzl} . \end{aligned} \quad (4.2)$$

Таким образом, тензор γ_{ijk} имеет не более 9 независимых компонент. Вместо тензора γ_{ijk} можно ввести вектор гирации \mathbf{g}' и/или вместо обратного тензора, вектор \mathbf{f}' :

$$\gamma_{ijl} k_l = \gamma_{ijl} \tilde{n} s_l = e_{ijm} g'_m , \quad (4.3)$$

$$\delta_{ijl} K_l = \tilde{n} s_l = e_{ijm} f'_m . \quad (4.4)$$

Здесь e_{ijm} - единичный псевдотензор третьего ранга (который при зеркальном отражении не меняет знак) ($e_{123} = 1$, $e_{213} = -1$, $e_{112} = 0, \dots$). Тогда можно записать:

$$D_i = \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j = \varepsilon_{ij}(\omega) E_j - i[\mathbf{g}' \times \mathbf{E}]_i , \quad (4.5)$$

$$E_i = \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D_j = \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega) D_j - i[\mathbf{f}' \times \mathbf{D}]_i . \quad (4.6)$$

Вид тензора γ_{ijl} зависит от симметрии кристалла. Так в кристалле, имеющем центр симметрии, $\gamma_{ijl} \equiv 0$. Действительно, все компоненты тензора третьего ранга должны менять знак при инверсии, при этом симметрия кристалла требует, чтобы они оставались неизменными.

Пример 1: Изотропное тело и кубический кристалл.

В этом случае тензор γ_{ijl} сводится к псевдоскаляру:

$$\varepsilon_{ij}^{(0)} = \varepsilon \delta_{ij} ; \gamma_{ijl} = \gamma e_{ijl} . \quad (4.7)$$

Псевдоскаляр γ меняет знак при инверсии. Отсюда

$$D_i = \varepsilon(\omega)E_i + i\gamma(\omega)\tilde{n}e_{ij}E_j s_i \text{ или } \mathbf{D} = \varepsilon(\omega)\mathbf{E} + i\gamma(\omega)\tilde{n}[\mathbf{E} \times \mathbf{s}] . \quad (4.8)$$

В изотропной, гиротропной среде поле \mathbf{E} поперечно ($\mathbf{E} \cdot \mathbf{s} = 0$), так же как и индукция \mathbf{D} . Для поперечных волн имеем:

$$-n^2\mathbf{E} + \varepsilon(\omega)\mathbf{E} + i\gamma\tilde{n}(\omega)[\mathbf{E} \times \mathbf{s}] = 0 . \quad (4.9)$$

Из условия, что однородное уравнение (4.9) для \mathbf{E} имеет ненулевые решения, получаем квадратное уравнение для показателя преломления \tilde{n} , решение которого имеет вид

$$\tilde{n}_{\pm}^2 = \varepsilon \pm \gamma\sqrt{\varepsilon} . \quad (4.10)$$

Отсюда получаем, что в изотропной среде или в кубическом кристалле могут распространяться две волны, поляризованные по правому и левому кругу $E_{\pm} = (E_x \pm iE_y)$ с разными показателями преломления \tilde{n}_{\pm} . Волна, поляризованная по правому кругу $E_y = e^{-i\pi/2}E_x$, распространяется с показателем преломления

$$\tilde{n}_+ \approx \sqrt{\varepsilon} + \frac{1}{2}\gamma ,$$

а волна, поляризованная по левому кругу $E_y = e^{i\pi/2}E_x$, распространяется с показателем преломления

$$\tilde{n}_- \approx \sqrt{\varepsilon} - \frac{1}{2}\gamma .$$

Гиротропию называют еще явлением невзаимного кругового двулучепреломления. Главным отличительным свойством явления естественной оптической активности является его невзаимность. Если на пути луча поставить зеркало и тем самым изменить направление волнового вектора на противоположное, весь эффект кругового двулучепреломления исчезнет.

Линейно поляризованную волну можно представить как сумму двух циркулярно поляризованных волн:

$$E_x = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) \text{ и } E_y = \frac{1}{2i}(E_+ - E_-) , \quad (4.11)$$

$$E_x = E_0 \exp\left(i\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon}z\right) \cos\left(\frac{\omega\gamma}{2c}z\right) \text{ и } E_y = E_0 \exp\left(i\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon}z\right) \sin\left(\frac{\omega\gamma}{2c}z\right) . \quad (4.12)$$

Отсюда видно, что плоскость поляризации линейно поляризованной волны, распространяющейся в гиротропной среде, поворачивается на угол φ ($\operatorname{tg}\varphi = E_y / E_x$) при прохождении расстояния z :

$$\frac{\varphi}{z} = \frac{\omega\gamma}{2c} . \quad (4.13)$$

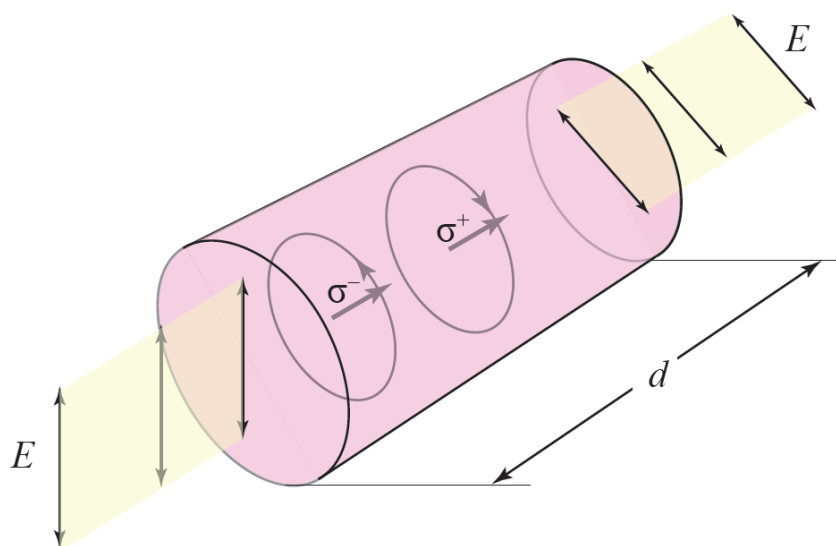


Рис 4.1. Поворот плоскости поляризации света в гиротропном кристалле при прохождении расстояния d . Показано, что нормальные волны в гиротропном кристалле поляризованы по кругу σ^+ или σ^- .

Из (4.5), (4.6) и (1.16) следует, что для наблюдения явления гиротропии важна только поперечная часть поля \mathbf{E} . В результате в некоторых кристаллах гиротропия не наблюдается несмотря на отсутствие центра инверсии. Например, это имеет место в кристаллах групп C_{3v} , C_{4v} , C_{6v} и T_d [22]. Нормальные волны в таких кристаллах вообще говоря имеет эллиптическую поляризацию, однако это не приводит к повороту плоскости поляризации. Эллиптичность проявляется только в появлении продольной составляющей поля \mathbf{E} , для поля \mathbf{D} эллиптичность не появляется. Это называется *слабой гиротропией*, ее иногда можно наблюдать в спектрах отражения кристаллов при наклонном падении света (см. [11]).

Пример 2: Гиротропия вблизи экситонного резонанса в квантовой яме

В симметричной квантовой яме, изготовленной на основе кубических полупроводников, может иметь место гиротропия при распространении света в плоскости ямы. Вклад в тензор диэлектрической проницаемости, связанный с гиротропией, для структуры с квантовой ямой, имеющей симметрию D_{2d} имеет вид

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\gamma(\omega)k_y \\ 0 & 0 & i\gamma(\omega)k_x \\ -i\gamma(\omega)k_y & -i\gamma(\omega)k_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

В области экситонного резонанса величина $\gamma(\omega)$ определяется линейным по волновому вектору вкладом в дисперсию экситона. Рассмотрим теперь вклад линейных по волновому вектору слагаемых в тензор поляризуемости в области экситонного резонанса в квантовой яме на основе кубического полупроводника. Пусть квантовая яма выращена в направлении $z \parallel [001]$. В геометрии $(k_x \neq 0, k_z \neq 0, k_y = 0)$ в области экситона с легкой дыркой тензор восприимчивости выглядит так:

$$\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{d_x^2}{\tilde{\omega}_0} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\tilde{\omega}_L d_y^2}{\tilde{\omega}_0 \omega_L + (Ck_x)^2} & \frac{iCk_x d_z d_y}{\tilde{\omega}_0 \omega_L + (Ck_x)^2} \\ 0 & \frac{-iCk_x d_z d_y}{\tilde{\omega}_0 \omega_L + (Ck_x)^2} & \frac{\tilde{\omega}_0 d_z^2}{\tilde{\omega}_0 \omega_L + (Ck_x)^2} \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Здесь $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 - \omega - i\Gamma$, $\tilde{\omega}_L = \omega_L - \omega - i\Gamma$, ω_L - частота продольного состояния экситона, ω_0 - частота поперечного экситонного резонанса, C константа при линейном по волновому вектору слагаемом в дисперсии экситона, d_i матричные элементы дипольного момента экситонного перехода (2.13).

Вклад Рашбы [12] определяется конкретной асимметрией потенциала границ ямы. В асимметричной (например, треугольной) квантовой яме также имеется слабая гиротропия, даже в структурах на основе центросимметричных кристаллов таких как Ge или Si [13].

Пример 3 Гексагональный кристалл со структурой вюрцита.

В гексагональных кристаллах в области экситона серии A (см. Приложение 1) гиротропии нет. В геометрии $\mathbf{k} \perp C_6$ наличие линейного по волновому вектору слагаемого в экситонном гамильтониане приводит к смешиванию оптически активного и оптически запрещенного экситона или оптически активного состояния серии A с экситоном серии B . Но поскольку вблизи экситона серии A выполняется соотношение $\frac{|\omega_A - \omega|}{|\omega_B - \omega|} \ll 1$, этот вклад пренебрежимо мал.

Для экситона серии B возможно наблюдение гиротропии при наклонном падении света. Картина в целом похожа на случай квантовой ямы. Экситонный вклад в восприимчивость в геометрии $\mathbf{k} \parallel x$, $z \parallel C_6$ выглядит следующим образом:

$$\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{\omega}_\perp d_\perp^2}{\tilde{\omega}_\perp \tilde{\omega}_\parallel + (\gamma k_x)^2} & 0 & \frac{-i\gamma k_x d_\perp d_\parallel}{\tilde{\omega}_\perp \tilde{\omega}_\parallel + (\gamma k_x)^2} \\ 0 & \frac{d_\perp^2}{\tilde{\omega}_\perp} & 0 \\ \frac{i\gamma k_x d_\perp d_\parallel}{\tilde{\omega}_\perp \tilde{\omega}_\parallel + (\gamma k_x)^2} & 0 & \frac{\tilde{\omega}_\perp d_\parallel^2}{\tilde{\omega}_\perp \tilde{\omega}_\parallel + (\gamma k_x)^2} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Здесь: $\tilde{\omega}_{\perp} = \omega_{\Gamma_3} - \omega - i\Gamma$, $\tilde{\omega}_{\parallel} = \omega_{\Gamma_1} - \omega - i\Gamma$, ω_L - частота продольного состояния экситона, ω_{Γ_3} - частота экситонного резонанса поляризованного перпендикулярно оси кристалла, ω_{Γ_1} - частота экситонного резонанса поляризованного параллельно оси кристалла, d_i матричные элементы дипольного момента соответствующего экситонного перехода.

Из (4.16) видно, что в гексагональном кристалле в области экситона серии B имеет место явление слабой гиротропии, когда поперечная волна смешивается с продольной. В таком случае явление оптической активности можно наблюдать в спектрах отражения при наклонном падении света, как это и наблюдалось в работе [11].

5. Влияние магнитного поля

Рассмотрим слагаемые в разложении тензора диэлектрической проницаемости (2.3) и обратного тензора диэлектрической проницаемости (2.4), зависящие только от магнитного поля

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) = A_{ijl}^{(1)}(\omega)H_l + A_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_kH_l \quad \text{и} \quad \delta\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{H}) = \tilde{A}_{ijl}^{(1)}(\omega)H_l + \tilde{A}_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_kH_l. \quad (5.1)$$

Эти слагаемые описывают в частности эффект Фарадея, и эффект Фогта. Симметрия по отношению к инверсии времени требует, чтобы

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) = \delta\varepsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{H}). \quad (5.2)$$

При отсутствии поглощения тензор $\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H})$ должен быть эрмитовым, но не обязательно вещественным. Отсюда следует, что вещественная часть тензора $\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H})$ должна быть симметричной, а мнимая часть антисимметричной:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) &= -\operatorname{Re} \delta\varepsilon_{ji}(\omega, \mathbf{H}) = \operatorname{Re} \delta\varepsilon_{ij}(\omega, -\mathbf{H}), \\ \operatorname{Im} \delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) &= -\operatorname{Im} \delta\varepsilon_{ji}(\omega, \mathbf{H}) = -\operatorname{Im} \delta\varepsilon_{ij}(\omega, -\mathbf{H}). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Для обратного тензора $\delta\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{H})$ справедливы аналогичные соотношения. Из (5.3) следует, что в непоглощающей среде

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) &= A_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_kH_l, \\ \operatorname{Im} \delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) &= A_{ijl}^{(1)}(\omega)H_l. \end{aligned} \quad (5.4)$$

И условия на коэффициенты:

$$\begin{aligned} A_{ijkl}^{(2)} &= A_{jikl}^{(2)} = A_{ijlk}^{(2)} = A_{jilk}^{(2)} \\ A_{ijl}^{(1)} &= -A_{jil}^{(1)} \end{aligned}$$

Магнитооптические эффекты удобно рассматривать с помощью обратного тензора: $\delta\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{H})$. Обозначим:

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) &= \varepsilon'_{ij} + i\varepsilon''_{ij}, \\ \delta\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{H}) &= \eta'_ij + i\eta''_{ij}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Как известно, всякий антисимметричный тензор второго ранга дуален некоторому вектору, так что можно записать мнимые части тензоров $\delta\varepsilon_{ij}$ и $\delta\varepsilon_{ij}^{-1}$ в виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon''_{ij} &= e_{ijk}g_k \\ \eta''_{ij} &= e_{ijk}G_k \end{aligned} \quad (5.6)$$

Тогда для поля \mathbf{E} получим:

$$E_i = (\eta'_{ij} + i\varepsilon_{ijk} G_k) D_j = \eta'_{ij} D_j + i[\mathbf{D} \times \mathbf{G}]_i, \quad (5.7)$$

и аналогично для поля \mathbf{D} :

$$D_i = \varepsilon'_{ij} E_j + i[\mathbf{E} \times \mathbf{g}]_i. \quad (5.8)$$

Рассмотрим распространение волны в произвольной гиротропной среде. Пусть волновой вектор волны направлен вдоль оси z , тогда с учетом поперечности поля \mathbf{D} , дисперсионное уравнение (1.21) запишется в виде

$$\left(\eta_{\alpha\beta} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \delta_{\alpha\beta} \right) D_\beta = \left(\eta'_{\alpha\beta} + i\eta''_{\alpha\beta} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \delta_{\alpha\beta} \right) D_\beta = 0, \quad (5.9)$$

где $\alpha, \beta \equiv x, y$. Направление осей x, y выберем вдоль главных осей тензора $\eta'_{\alpha\beta}$, и его главные значения обозначим как n_{01}^2 и n_{02}^2 . Тогда система уравнений (5.7) запишется:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{n_{01}^2} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \right) D_x + iG_z D_y = 0 \\ -iG_z D_x + \left(\frac{1}{n_{02}^2} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \right) D_y = 0 \end{cases}. \quad (5.10)$$

Условие существования решений этой системы выглядит следующим образом:

$$\left(\frac{1}{n_{01}^2} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \right) \left(\frac{1}{n_{02}^2} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \right) = G_z^2. \quad (5.11)$$

Отсюда следует, что в кристалле могут распространяться две волны, имеющие два разных показателя преломления для заданного направления распространения:

$$\tilde{n}_x^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{n_{01}^2} + \frac{1}{n_{02}^2} \right) \pm \sqrt{4 \left(\frac{1}{n_{01}^2} - \frac{1}{n_{02}^2} \right)^2 + G_z^2}. \quad (5.12)$$

Подставляя (5.12) в уравнение (5.10) получим:

$$\frac{D_y}{D_x} = \frac{i}{G_z} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{n_{01}^2} - \frac{1}{n_{02}^2} \right) \mp \sqrt{4 \left(\frac{1}{n_{01}^2} - \frac{1}{n_{02}^2} \right)^2 + G_z^2} \right]. \quad (5.13)$$

Видно, что это отношение чисто мнимое. Это значит, что волны поляризованы эллиптически. Главные оси эллипса поляризации совпадают с осями x, y . Произведение двух значений этого отношения равно единице. Получаем, что если в одной из волн $\frac{D_y^{(1)}}{D_x^{(1)}} = i\rho$, то во второй волне

$\frac{D_x^{(2)}}{D_y^{(2)}} = -i\rho$, где ρ - отношение длин осей эллипса поляризации. Если $\rho > 0$ то волна поляризована по правому кругу, если $\rho < 0$, то по левому кругу, если $\rho = 0$, то волна поляризована линейно. Таким образом эллипсы поляризации двух волн имеют одинаковое отношение осей, но повернуты на 90° друг относительно друга. Напомним, что компоненты вектора \mathbf{G} и главные значения тензора $\eta'_{ij} - n_{01}$ и n_{02} зависят от напряженности магнитного поля. В слабом поле можно положить $G_i \approx f_{ij}H_j$.

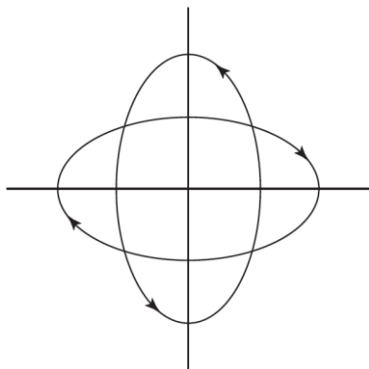


Рис 5.1. Эллипсы поляризации двух волн, распространяющихся вдоль магнитного поля.

Магнитное поле приводит к появлению эллиптической поляризации у волны изначально поляризованной линейно. Величина эллиптичности зависит от напряженности магнитного поля. Наиболее ярко магнитооптические эффекты проявляются при распространении света вдоль оптических осей кристаллов или в изотропной негиротропной среде, когда $n_{01} = n_{02}$ и/или в кристалле кубической симметрии.

5.1. Линейные по магнитному полю эффекты. Круговое магнитное двууплощение (Эффект Фарадея)

В изотропной среде тензор диэлектрической проницаемости сводится к скаляру ε . Пусть магнитное поле и волновой вектор света направлены вдоль оси z , а остальные компоненты магнитного поля и волнового вектора равны нулю. Тогда уравнения (5.7) и (5.8) запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{D} + i[\mathbf{D} \times \mathbf{G}], \\ \mathbf{D} &= \varepsilon \mathbf{E} + i[\mathbf{E} \times \mathbf{g}]. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Главные значения тензора $\eta'_{\alpha\beta}$ в изотропной среде равны $n_{01} = n_{02} = n_0 = \sqrt{\varepsilon}$. Отсюда:

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} = \frac{1}{n_0^2} \mp G_z \quad \text{или} \quad \tilde{n}_\pm^2 = n_0^2 \pm n_0^4 G_z = n_0^2 \mp g_z. \quad (5.15)$$

Каждому из двух значений показателя преломления \tilde{n}_{\pm} соответствует круговая поляризация:

$$D_x = \mp i D_y, \quad (5.16)$$

то есть мы имеем две распространяющиеся волны с показателями преломления \tilde{n}_{+} и \tilde{n}_{-} поляризованные по правому и левому кругу. Данное явление можно назвать *магнитным двойным круговым лучепреломлением*. Линейно поляризованную волну можно разложить на сумму двух циркулярно поляризованных волн. Отсюда получается, что при распространении волн с показателями преломления \tilde{n}_{+} и \tilde{n}_{-}

$$\begin{aligned} D_x &= \frac{1}{2} \left(e^{\frac{i\omega}{c} n_+ z} + e^{\frac{i\omega}{c} n_- z} \right) = e^{ikz} \cos \kappa z, \\ D_y &= \frac{i}{2} \left(-e^{\frac{i\omega}{c} n_+ z} + e^{\frac{i\omega}{c} n_- z} \right) = e^{ikz} \sin \kappa z. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Здесь $k = \frac{\omega}{2c} (n_+ + n_-)$ и $\kappa = \frac{\omega}{2c} (n_+ - n_-)$. После прохождения слоя l отношение амплитуд станет:

$$\frac{D_y}{D_x} = tg \kappa l, \quad (5.18)$$

И при прохождении слоя толщиной l в магнитном поле плоскость поляризации линейно поляризованного света поворачивается на угол $\kappa l = \frac{\omega g}{2cn_0} l$. В изотропной среде поворот плоскости поляризации характеризуется постоянной Верде κ , равной углу поворота плоскости поляризации на единицу длины и магнитного поля $\kappa = \frac{\omega}{2c} (\tilde{n}_{+} - \tilde{n}_{-})$. Эффект Фарадея в чистом виде можно наблюдать только при распространении света вдоль магнитного поля в направлении оптических осей кристалла. При распространении света вдоль других направлений эффект Фарадея осложняется эффектами двойного лучепреломления.

В отличие от гиротропии, которая также связана с циркулярным двулучепреломлением, эффект Фарадея взаимный. Это значит, что если на пути луча поставить зеркало, и заставить луч «вернуться» то эффект Фарадея удвоится, а эффект связанный с гиротропией исчезнет.

Пользуясь правилом (B4) получим, что тензор $A_{ijl}^{(1)}(\omega)H_l$ в кубическом кристалле в геометрии $H_x \parallel [100]$, $H_y \parallel [010]$, $H_z \parallel [001]$ содержит только одну константу и имеет вид:

$$A_{ijl}^{(1)}(\omega)H_l = \begin{bmatrix} \varepsilon(\omega) & -A^{(1)}(\omega)H_z & A^{(1)}(\omega)H_y \\ A^{(1)}(\omega)H_z & \varepsilon(\omega) & -A^{(1)}(\omega)H_x \\ -A^{(1)}(\omega)H_y & A^{(1)}(\omega)H_x & \varepsilon(\omega) \end{bmatrix}. \quad (5.19)$$

В гексагональном кристалле он содержит уже две константы α и β . Для циркулярно поляризованных волн $D_{\pm} = D_x \pm iD_y$ и $E_{\pm} = E_x \pm iE_y$ из симметрии кристалла следует, что поле

H_z не смешивает состояния с поляризацией E_+ и E_- . Поле $H_{\perp} = H_x \pm iH_y$ смешивает компоненты E_z и E_{\pm} . В базисе циркулярно поляризованных волн E_+ , E_- и E_z получим:

$$A_{ij}^{(1)}(\omega)H_i = \begin{bmatrix} \varepsilon_{\perp}(\omega) + \alpha H_z & 0 & \beta H_+ \\ 0 & \varepsilon_{\perp}(\omega) - \alpha H_z & \beta H_- \\ \beta H_+ & \beta H_- & \varepsilon_{\parallel}(\omega) \end{bmatrix}. \quad (5.20)$$

Здесь $H_{\pm} = H_x \pm iH_y$.

Эффект Фарадея является нечетным по магнитному полю. Это значит, что при смене знака магнитного поля на противоположный направление поворота плоскости поляризации света изменится на противоположное.

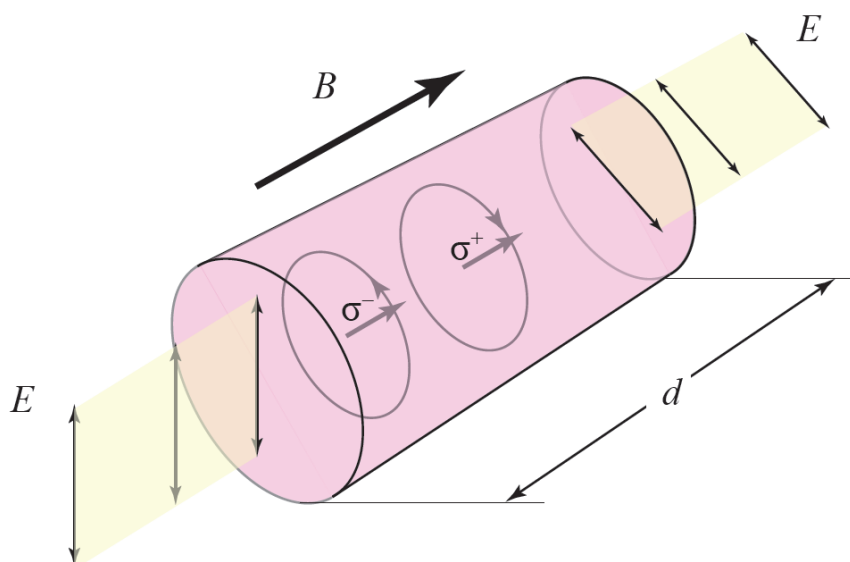


Рис 5.2. Поворот плоскости поляризации света в магнитном поле \mathbf{B} в геометрии Фарадея при прохождении расстояния d .

5.2. Квадратичное магнитное двупреломление (Эффект Фогта)

Эффект Фогта в жидких телах называют также эффектом Коттона-Мутона. Пусть магнитное поле направлено перпендикулярно направлению распространения волны. Тогда в уравнениях (5.10), (5.11) $G_z = 0$, и главные значения показателей преломления n_{01} и n_{02} будут:

$$n_{01}^2 = \eta_{\parallel} \text{ и } n_{02}^2 = \eta_{\perp} . \quad (5.21)$$

Отсюда

$$n^{-2} = \eta_{\parallel} , D_y = 0 ,$$

и таким образом одна из волн поляризована линейно вдоль оси x , а другая волна вдоль оси y .

$$n^{-2} = \eta_{\perp} , D_x = 0 ,$$

Здесь η_{\parallel} и η_{\perp} - главные значения тензора ϵ_{ij}^{-1} .

При прохождении плоскопараллельной пластинки линейно поляризованный свет становится вообще говоря эллиптически поляризованным.

Эффект Фогта является четным по магнитному полю. Это значит, что знак эффекта не зависит от знака магнитного поля. Это обстоятельство позволяет разделить эффект Фарадея и Фогта в случае распространения света под углом к полю.

5.3. Эффект Зеемана для экситона (см. Приложение)

Вблизи резонансных частот в кристаллах эффект Фарадея непосредственно связан с эффектом Зеемана. В магнитном поле все состояния расщепляются по энергии на состояния с магнитным моментом \mathbf{M} , направленным по полю или противоположно полю: $E_{\pm} = \pm \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}$. Это значит, что состояния с противоположно направленными моментами имеют разные резонансные частоты. Таким образом, вклад в диэлектрическую проницаемость от этих резонансов на одной частоте но в двух противоположных круговых поляризациях оказывается разным. Это и есть эффект Фарадея, или эффект циркулярного двулучепреломления. Рассмотрим эффект Зеемана на примере основного состояния экситона в кристаллах кубической и гексагональной симметрии.

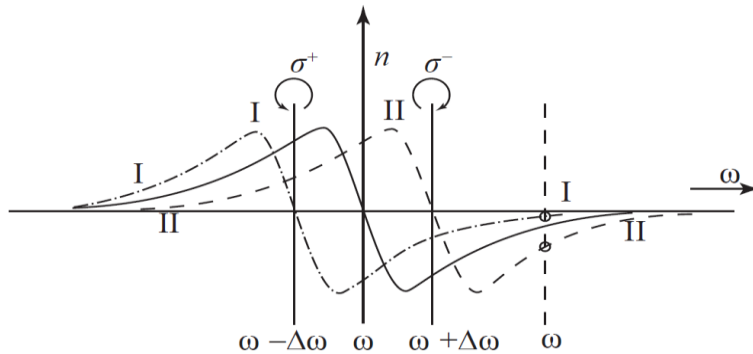


Рис 5.3. Качественный ход дисперсии показателя преломления $n(\omega)$ вблизи резонанса ω_0 . В отсутствие магнитного поля - сплошная кривая. В магнитном поле: кривая I для света поляризованного по левому кругу σ^- , кривая II для света поляризованного по правому кругу σ^+ . $\Delta\omega$ - величина зеемановского расщепления.

a). Кубический кристалл симметрии T_d .

В основном состоянии экситона орбитальный момент равен нулю, и зеемановское расщепление определяется только спиновым расщеплением электронов и дырок. Зависящая от спина часть экситонного гамильтониана для кубического кристалла выглядит так [14]:

$$H_{spin} = \Delta_1 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{J}) + \Delta_2 (\sigma_x J_x^3 + \sigma_y J_y^3 + \sigma_z J_z^3) + g_e \mu_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}) - 2\mu_0 [\kappa (\mathbf{J} \cdot \mathbf{H}) + q (H_x J_x^3 + H_y J_y^3 + H_z J_z^3)] \quad (5.22)$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma}$ - вектор матриц Паули, действующих на электроны. \mathbf{J} - вектор составленный из матриц J_x, J_y, J_z углового момента $3/2$ для дырок, κ и q - параметры играющие роль g -фактора дырки, μ_0 - магнетон Бора. Этот гамильтониан содержит изотропную Δ_1 и анизотропную Δ_2 части обменного взаимодействия. Обычно анизотропная часть обмена мала по сравнению с изотропной, и мы ей пренебрежем. Обменное взаимодействие приводит к расщеплению 8-кратно вырожденного основного состояния экситона на оптически активные (с моментом 1) и дипольно-запрещенные (с моментом 2) состояния. Для расчета величин зеемановского расщепления основного состояния экситона необходимо найти собственные значения спинового гамильтониана. Линейное по магнитному полю расщепление энергий получим уже в первом порядке теории возмущений на волновых функциях основного состояния экситона.

При учете спина волновые функции экситона (Приложение 1.51) - (Приложение 1.53) следует дополнить спиновыми индексами $\mathbf{s}_e = \pm 1/2$ для электрона и $\mathbf{s}_h = \pm 3/2$ для тяжелой или $\mathbf{s}_h = \pm 1/2$ для легкой дырки:

$$u_{e\mathbf{k}_e}(\mathbf{r}_e) u_{h\mathbf{k}_h}(\mathbf{r}_h) \equiv u_{e\mathbf{k}_e}(\mathbf{r}_e, \mathbf{s}_e) u_{h\mathbf{k}_h}(\mathbf{r}_h, \mathbf{s}_h) \quad (5.23)$$

При рассмотрении экситона удобно перейти к экситонному спиновому базису $|\mathbf{J}^{(i)}, J_i^{(i)}\rangle$, здесь $\mathbf{J}^{(i)} = \mathbf{J} + \boldsymbol{\sigma}$, ($J^{(i)} = 1$ или 2), ось квантования выбирается вдоль магнитного поля.

В кубическом кристалле картина зеемановского расщепления экситона довольно громоздка [15] и для простоты будем рассматривать только оптически активные состояния экситона $|1,1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|1,-1\rangle$ в σ^+ , π и σ^- поляризациях соответственно. Тогда матрица спинового гамильтониана в экситонном базисе в сферическом приближении ($\Delta_2 = 0$, $q = 0$) будет выглядеть следующим образом:

	$ 1,1\rangle$	$ 1,0\rangle$	$ 1,-1\rangle$
$E_0 + \mu \left(\frac{g}{2} + 5\kappa \right) H$		0	0
0		E_0	0
0		0	$E_0 + \mu \left(\frac{g}{2} + 5\kappa \right) H$

$$(5.24)$$

Схема расщепления уровней экситона в кубическом кристалле в сферическом приближении представлена на Рисунке 5.4. Как видно из рисунка, в кубическом кристалле состояния оптически активного и оптически запрещенного экситона в нулевом магнитном поле расщеплены обменным взаимодействием. В магнитном поле в геометрии Фарадея они расщепляются линейно по полю независимо друг от друга.

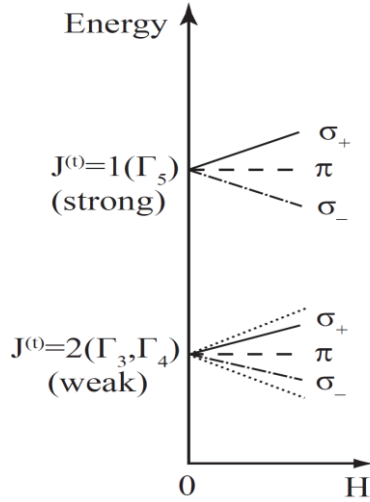


Рис 5.4. Схема зеемановского расщепления экситона в кубическом кристалле с симметрией T_d . $J^{(0)}=1$ соответствует оптиически активному состоянию экситона. $J^{(0)}=2$ соответствует оптиически запрещенному состоянию экситона. Эти состояния расщеплены обменным взаимодействием.

б). Гексагональный кристалл симметрии C_{6v} .

Спиновый гамильтониан для экситона A в кристаллах вюрцита в магнитном поле [16] имеет вид:

$$H_{spin} = \Delta_1 (\sigma_z^e \cdot \sigma_z^h) + g_h^{\parallel} \mu (\sigma_z^h \cdot B_z) + g_e^{\parallel} \mu (\sigma_z^e \cdot B_z) + g_e^{\perp} (\sigma_+ \cdot B_+ + \sigma_- \cdot B_-) \quad (5.25)$$

Здесь $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$ - матрицы Паули, $B_{\pm} = B_x \pm iB_y$, Δ_1 - константа обменного взаимодействия, ось z совпадает с гексагональной осью кристалла C_6 . Для основного состояния экситона серии A получим в геометрии $H \parallel C_6$:

$ 1/2, -3/2\rangle$	$ -1/2, 3/2\rangle$	$ 1/2, 3/2\rangle$	$ -1/2, -3/2\rangle$
$E_0 + \Delta_1$	$i\tilde{H}$		
$-i\tilde{H}$	$E_0 + \Delta_1$		
		$E_0 - \Delta_1$	$-i\tilde{H}$
		$i\tilde{H}$	$E_0 - \Delta_1$

(5.26)

здесь $\tilde{H} = \frac{1}{2} \mu (g_e^{\parallel} - g_h^{\parallel}) H_z$ и $\tilde{H} = \frac{1}{2} \mu (g_e^{\parallel} + g_h^{\parallel}) H_z$.

В геометрии $H \perp C_6$

$ 1/2, -3/2\rangle$	$ -1/2, 3/2\rangle$	$ 1/2, 3/2\rangle$	$ -1/2, -3/2\rangle$
$E_0 + \Delta_1$			\tilde{H}_-
	$E_0 + \Delta_1$	\tilde{H}_+	
	\tilde{H}_-	$E_0 - \Delta_1$	
\tilde{H}_+			$E_0 - \Delta_1$

(5.27)

здесь $\tilde{H}_{\pm} = \frac{1}{2} \mu g_e (H_x \pm iH_y)$.

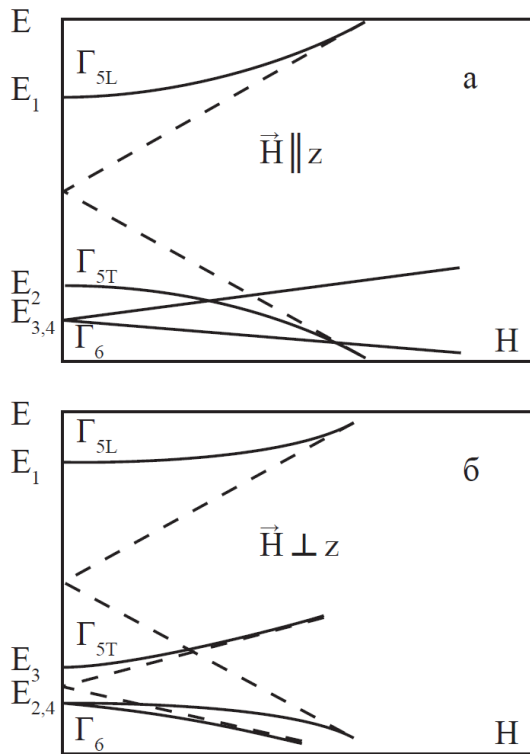


Рис 5.5а,б. Схема зеемановского расщепления экситона в кристалле со структурой вюрцита с симметрией C_{6v} . а) Магнитное поле направлено вдоль гексагональной оси, б) магнитное поле перпендикулярно гексагональной оси.

В геометрии $H \parallel C_6$ состояния оптически активного и запрещенного экситона расщепляются независимо друг от друга. В этой геометрии можно наблюдать эффект Фарадея при распространении света вдоль оптической оси кристалла.

В геометрии $H \perp C_6$ магнитное поле смешивает состояния оптически активного и запрещенного экситонов, расщепленных обменным взаимодействием. Таким образом, в этой геометрии имеет место эффект Фогта.

в). Квантовая яма на основе кубического полупроводника выращенная в направлении (100) и имеющая симметрию D_{2d} :

Пусть ось ямы направлена по оси z . В квантовой яме состояния легких и тяжелых дырок расщепляются вследствие размерного квантования. Для тяжелого экситона в геометрии $H \parallel z$ получим:

$ 1/2, -3/2\rangle$	$ -1/2, 3/2\rangle$	$ 1/2, 3/2\rangle$	$ -1/2, -3/2\rangle$
$E_0 + \Delta_1$	$i\tilde{H}$		
$-i\tilde{H}$	$E_0 + \Delta_1$		
		$E_0 - \Delta_1$	$-i\tilde{H}$
		$i\tilde{H}$	$E_0 - \Delta_1$

(5.28)

В квантовой яме, аналогично случаю гексагонального кристалла, состояния оптически активного экситона с моментом 1 и дипольно-запрещенного экситона, с моментом 2 расщепляются независимо друг от друга.

Используя матрицы гамильтониана (5.24), (5.26), (5.27) или (5.28) можно с помощью (2.25) построить тензор восприимчивости и /или тензор диэлектрической проницаемости и найти вклад зеemannовского расщепления экситона в эффекты Фарадея и Фогта.

5.4. Магнитооптический эффект Керра

При отражении линейно поляризованного света от кристалла во внешнем магнитном поле отраженный свет приобретает, вообще говоря, эллиптическую поляризацию, и это явление называют *магнитооптическим эффектом Керра*. Рассмотрим нормальное падение линейно поляризованного света на поверхность изотропного тела. Амплитуда отраженной волны \mathbf{E}_r в этом случае связана с амплитудой падающей волны \mathbf{E}_0 формулами Френеля:

$$\mathbf{E}_r = \frac{1-n}{1+n} \mathbf{E}_0 . \quad (5.29)$$

Линейно поляризованный свет можно представить, как сумму двух циркулярно поляризованных компонент. Если падающая волна поляризована вдоль оси x , то

$$\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_0^+ + \mathbf{E}_0^- , \quad (5.30)$$

или

$$E_{0x}^+ = iE_{0y}^+ = (1/2)E_0 ,$$

$$E_{0x}^- = -iE_{0y}^- = (1/2)E_0. \quad (5.31)$$

Из уравнения (5.14) следует:

$$E_{rx} = \frac{E_0}{2} \left[\frac{1-n_+}{1+n_+} + \frac{1-n_-}{1+n_-} \right] \approx E_0 \frac{1-n_0}{1+n_0}, \quad (5.32)$$

$$E_{ry} = \frac{iE_0}{2} \left[\frac{1-n_-}{1+n_-} - \frac{1-n_+}{1+n_+} \right] \approx iE_0 \frac{g}{n_0(1+n_0)^2}.$$

Получаем, что отраженная волна оказывается эллиптически поляризованной, большая ось эллипса направлена по оси x , а отношение малой оси к большой равно:

$$\frac{g}{n_0(1+n_0)^2}.$$

Пример 1: Эффект Фарадея в квантовой яме (100) на основе кубических полупроводников

В квантовой яме симметрии D_{2d} добавка в тензор диэлектрической проницаемости от магнитного поля, направленного вдоль оси z в геометрии Фарадея ($\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$), имеет вид:

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp}(\omega, H) & iA^{(1)}H_z & 0 \\ -iA^{(1)}H_z & \varepsilon_{\perp}(\omega, H) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z(\omega) \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Для определения компонентов тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\perp}(\omega)$, $\varepsilon_z(\omega)$, $iA^{(1)}H_z$ необходимо выбрать конкретную модель среды. Рассмотрим экситонный резонанс в квантовой яме. Пусть магнитное поле H_z направлено по оси $z \parallel (001)$ перпендикулярно плоскости квантовой ямы. Пренебрегаем квадратичной пространственной дисперсией. Если волны распространяющиеся перпендикулярно плоскости квантовой ямы, их продольные компоненты не играют никакой роли, и мы рассматриваем только поперечные компоненты поля и поляризации. Тензор восприимчивости (2.26) в этом случае запишется как

$$\chi_{ij}(\omega) = \frac{d^2}{(\omega_0 - \omega - i\Gamma)^2 - (\mu_0 g H_z)^2} \begin{bmatrix} \omega_0 - \omega - i\Gamma & -i\mu_0 g H_z \\ i\mu_0 g H_z & \omega_0 - \omega - i\Gamma \end{bmatrix}. \quad (5.34)$$

Здесь Γ - экситонное затухание, g - эффективный g -фактор экситона, d - дипольный момент экситонного перехода, μ_0 - магнетон Бора.

Отсюда видно, что вблизи резонанса, когда $\omega \approx \omega_0$ восприимчивость сильно возрастает и эффект Фарадея максимален на частотах вблизи резонансной частоты экситона $\omega = \omega_0$. Нормальные волны представляют собой две волны, поляризованные по правому и левому кругу. Компоненты $A^{(1)}(\omega)$ тензора $\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H})$ в (5.33) в данном случае имеют вид:

$$A^{(1)}(\omega) = \frac{\mu g d^2}{(\omega_0 - \omega - i\Gamma)^2 - (\mu_0 g H_z)^2}.$$

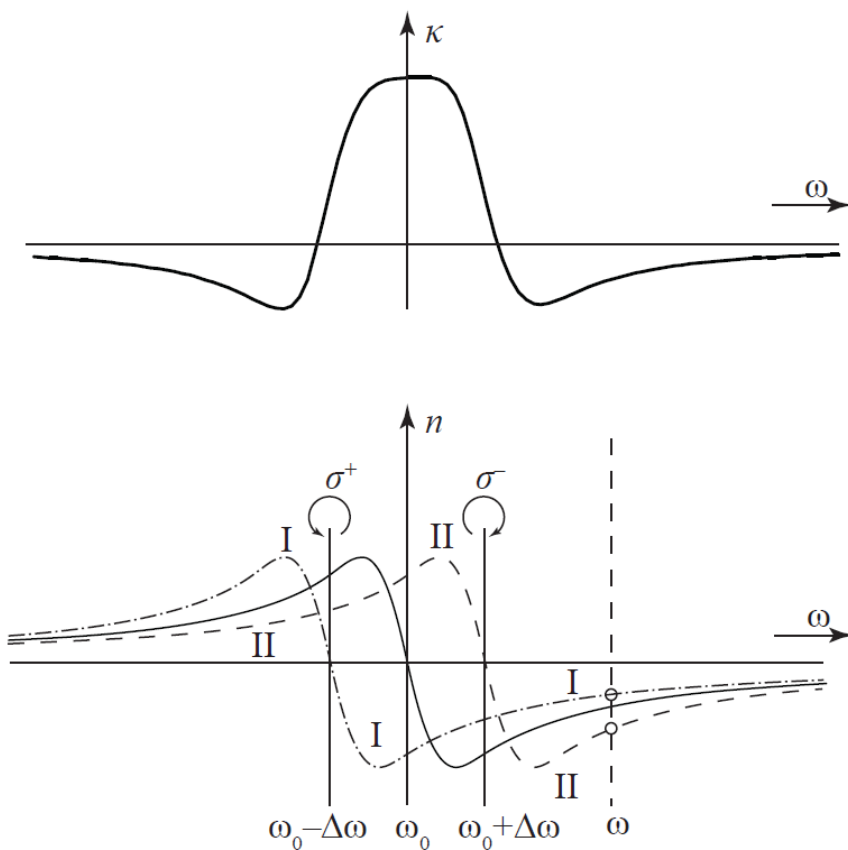


Рис 5.6. Связь зеемановского расщепления и фарадеевского вращения вблизи экситонного резонанса. а) зависимость постоянной Верде κ от частоты; б) зеемановское расщепление.

Пример 2а: Эффект Фарадея в гексагональном кристалле $\mathbf{k} \perp C_6$

В этом случае эффект Фарадея осложнен эффектом двулучепреломления. Пусть ось шестого порядка направлена вдоль оси z , магнитное поле направлено перпендикулярно оси z например вдоль оси y . Рассматривается геометрия Фарадея $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$. Линейный по полю вклад в тензор диэлектрической проницаемости имеет вид

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp}(\omega) & 0 & iA^{(1)}H_y \\ 0 & \varepsilon_{\perp}(\omega) & 0 \\ -iA^{(1)}H_y & 0 & \varepsilon_{\parallel}(\omega) \end{pmatrix} \quad (5.35)$$

Магнитное поле смешивает состояния с поляризацией вдоль оси z и вдоль оси x , т.е. состояния соответствующие с обыкновенному и необыкновенному лучам (3.7). В гексагональном кристалле резонансные частоты экситонов (ω_0^z) и (ω_0^x), поляризованных вдоль и поперек гексагональной оси отличаются друг от друга. Отсюда

$$\chi_{ij}(\omega) = \frac{d_x d_z}{(\omega_0^x - \omega - i\Gamma^x)(\omega_0^z - \omega - i\Gamma^z) - (\mu g H)^2} \begin{bmatrix} \omega_0^z - \omega - i\Gamma^z & -i\mu g H \\ i\mu g H & \omega_0^x - \omega - i\Gamma^x \end{bmatrix}. \quad (5.36)$$

Это дает степень эллиптичности $\frac{D_y}{D_x} = i\rho \approx \frac{\mu g H}{|\omega_0^z - \omega_0^x|}$, откуда следует, что двулучепреломление подавляет эффект Фарадея.

Пример 26: Эффект Фогта в гексагональном кристалле $\mathbf{H} \parallel C \parallel z, \mathbf{k} \perp C \perp \mathbf{k} \parallel y$

В этой геометрии магнитное поле смешивает состояния продольного и поперечного экситонов. Линейный по полю вклад в тензор диэлектрической проницаемости имеет вид

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{H}) = \begin{pmatrix} \varepsilon(\omega) & i\mu g_{\alpha} H_z & 0 \\ -i\mu g_{\alpha} H_z & \varepsilon(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (5.37)$$

Магнитное поле не влияет на компоненту поляризации вдоль поля, но смешивает продольную E_y и поперечную E_x компоненты поляризации. Таким образом магнитное поле вообще не влияет на поляризацию света при распространении света точно вдоль оси y . Эллиптичность может наблюдаться только при распространении света под углом к гексагональной оси.

6. Эффекты квадратичной пространственной дисперсии

Слагаемое $B_{ijkl}^{(2)}(\omega)k_k k_l$ в (2.3) описывает эффекты квадратичной пространственной дисперсии. Очевидно, что тензор $B_{ijkl}^{(2)}(\omega)$ должен быть симметричен по первой и второй паре индексов, но не обязан быть симметричным по обеим одновременно: $B_{ijkl}^{(2)} = B_{jikl}^{(2)} = B_{ijlk}^{(2)}$. В изотропной среде тензор сводится к единичному тензору $B^{(2)}k^2$. В кубическом кристалле он выглядит следующим образом:

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} B_1^{(2)}k_x^2 & B_2^{(2)}k_x k_y & B_2^{(2)}k_z k_x \\ B_2^{(2)}k_x k_y & B_1^{(2)}k_y^2 & B_2^{(2)}k_z k_y \\ B_2^{(2)}k_z k_x & B_2^{(2)}k_z k_y & B_1^{(2)}k_z^2 \end{pmatrix}. \quad (6.1)$$

Без учета этих слагаемых оптические свойства кубического кристалла эквивалентны свойствам изотропной среды (Глава 3). В кубическом кристалле тензор $\varepsilon_{ij}^0(\omega)$ диагонален и все его диагональные компоненты одинаковы. Учет $B_{ijkl}^{(2)}(\omega)k_k k_l$ приводит к тому, что оптические свойства кубического кристалла приобретают кубическую анизотропию [17].

При распространении света вдоль осей [001], [010] или [100] тензор $\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ имеет диагональный вид с коэффициентами $B_1^{(2)}k_x^2$, $B_1^{(2)}k_y^2$ и $B_1^{(2)}k_z^2$ соответственно.

При распространении света вдоль оси [111] $k_x = k_y = k_z \equiv k$, тензор имеет вид

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} B_1^{(2)}k^2 & B_2^{(2)}k^2 & B_2^{(2)}k^2 \\ B_2^{(2)}k^2 & B_1^{(2)}k^2 & B_2^{(2)}k^2 \\ B_2^{(2)}k^2 & B_2^{(2)}k^2 & B_1^{(2)}k^2 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Квадратичная пространственная дисперсия ярко проявляется в дисперсии экситона. Экситон может свободно перемещаться по кристаллу, кинетическая энергия экситона, обратно пропорциональна его массе $E_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$, здесь M - масса экситона как целого, k - волновой вектор экситона.

В наноструктурах движения экситона квантуется, поэтому зависимость $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H})$ от непрерывного волнового вектора k пропадает. Вместо этого появляется зависимость от дискретных уровней энергии $E_n \approx \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2ML^2$, где $n = 1, 2, 3, \dots$. В этом случае в формуле (6.2) следует заменить значения k^2 на $2ME_n / \hbar^2$.

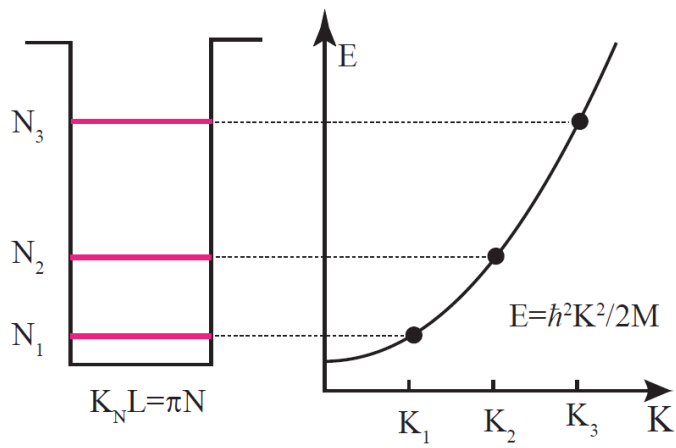


Рис 6.1. Дисперсия экситона в квантовой яме. Вместо непрерывной зависимости энергии от волнового вектора $E = \hbar^2 K^2 / 2M$ имеем дискретные уровни $E_N = \hbar^2 \pi^2 N^2 / 2ML$, где L - ширина квантовой ямы.

7. Билинейные по магнитному полю и волновому вектору слагаемые

Особенно много новых явлений связано с билинейными по магнитному полю и волновому вектору слагаемыми $C_{ijkl}^{(2)}(\omega)H_k^{(0)}k_l$ (2.3), (2.4). Как следует из симметрии по отношению к обращению времени (2.1) тензор $C_{ijkl}^{(2)}(\omega)$ симметричен по первым двум индексам. Это слагаемое появляется только в кристаллах, в которых отсутствует центр инверсии. Именно это слагаемое ответственно за «эффект инверсии магнитного поля» [18] и «эффект магнитоиндуцированной пространственной дисперсии оптических осей кристалла» [19, 20]. В квантовой яме эти слагаемые являются ответственным за недавно обнаруженный «эффект четности» [21].

Рассмотрим подробно билинейное по магнитному полю и волновому вектору слагаемое в разложении тензора диэлектрической проницаемости (2.3). Запишем тензор $C_{ijkl}^{(2)}$ в виде $C_{ijkl}^{(2)} = C_{ijkl}^{(S)} + C_{ijkl}^{(A)}$ где $C_{ijkl}^{(S)}$ симметричен по индексам k, l ($C_{ijkl}^{(S)} = C_{ijlk}^{(S)}$), $C_{ijkl}^{(A)}$ асимметричен по индексам k, l ($C_{ijkl}^{(A)} = -C_{ijlk}^{(A)}$). Асимметричный тензор $C_{ijkl}^{(A)}$ можно записать как $C_{ijkl}^{(A)} = C_{mij}e_{klm}$, где e_{klm} антисимметричный тензор Леви-Чивита. Тогда:

$$C_{ijkl}^{(2)}H_k^{(0)}k_l = C_{ijm}[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_m + C_{ijkl}^{(S)}H_k^{(0)}k_l. \quad (7.1)$$

Объемный кристалл типа вюрцита с симметрией C_{6v} [16, 22].

Отличны от нуля следующие компоненты тензоров \mathbf{C} и $\mathbf{C}^{(S)}$:

$$\begin{aligned} C_{zzz}; C_{yyz} = C_{zyz} = C_{xzx} = C_{zxx}; C_{zxx} = C_{zyy} \\ C_{xxx}^{(S)} = C_{yyy}^{(S)} = -C_{xyx}^{(S)} = -C_{yxx}^{(S)}; C_{yzx}^{(S)} = -C_{xzy}^{(S)}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Антисимметричная добавка имеет вид

$$\delta\epsilon_{ij}^{(A)}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) = \begin{pmatrix} C_{\perp}[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_z & 0 & C[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_x \\ 0 & C_{\perp}[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_z & C[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_y \\ C[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_x & C[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_y & C_{\perp}[\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_z \end{pmatrix}. \quad (7.3)$$

Симметричная добавка в тензоре имеет вид

$$\delta\epsilon_{ij}^{(S)}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) = \begin{pmatrix} C_1(H_x k_y + H_y k_x) & C_1(H_y k_y - H_x k_x) & -C_2(H_y k_z + H_z k_y) \\ C_1(H_y k_y - H_x k_x) & -C_1(H_x k_y + H_y k_x) & C_2(H_x k_z + H_z k_x) \\ -C_2(H_y k_z + H_z k_y) & C_2(H_x k_z + H_z k_x) & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.4)$$

Замечание: Диагональные компоненты тензоров (7.3) и (7.4) описывают эффект инверсии магнитного поля. Все остальные, недиагональные компоненты, описывают изменение свойств поляризации в магнитном поле, т.е. эффекты магнитоиндуцированной пространственной дисперсии оптических осей кристалла.

Объемный кристалл симметрией цинковой обманки T_d .

Билинейные по волновому вектору и магнитному полю слагаемые [20, 22] имеют вид

$$C_{ijkl}^{(2)} H_k^{(0)} k_l = C_{ijm} [\mathbf{H} \times \mathbf{k}]_m + C_{ijkl}^{(S)} H_k^{(0)} k_l \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (7.5)$$

Отличны от нуля следующие компоненты тензоров \mathbf{C} и $\mathbf{C}^{(S)}$:

$$C_{ijm} = C_1$$

$$C_{xyyy}^{(S)} = C_{yyzz}^{(S)} = C_{zzxx}^{(S)} - C_{yyxx}^{(S)} = -C_{zzyy}^{(S)} = -C_{xxzz}^{(S)} = C_2. \quad (7.6)$$

Таким образом, билинейные по волновому вектору и магнитному полю члены в тензоре диэлектрической проницаемости в кубических кристаллах выглядят как:

$$C_{ijkl}^{(2)} H_k k_l = \begin{bmatrix} C_2(H_y k_y - H_z k_z) & C_1(H_y k_x - H_x k_y) & C_1(H_x k_z - H_z k_x) \\ C_1(H_y k_x - H_x k_y) & C_2(H_z k_z - H_x k_x) & C_1(H_z k_y - H_y k_z) \\ C_1(H_x k_z - H_z k_x) & C_1(H_z k_y - H_y k_z) & C_2(H_x k_x - H_y k_y) \end{bmatrix}, \quad (7.7)$$

Здесь $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$, $z \parallel [001]$.

Замечание: Диагональные компоненты тензора $C_{ijkl}^{(2)}(\omega)$ описывают эффект четности. Недиagonальные компоненты описывают эффект магнито-индуцированного двулучепреломления и эффект инверсии магнитного поля. Рассмотрим эти эффекты подробнее.

7.1. Эффект инверсии магнитного поля

Экспериментально установлено, что интенсивность и положение линий в спектрах пропускания и отражения света могут зависеть от знака магнитного поля или волнового вектора, при этом одновременная смена знака магнитного поля и волнового вектора не приводила к изменению спектра [18, 23].

Для объяснения этого явления рассмотрим поглощаемую мощность в единицу времени в единице объема [22]:

$$W = \frac{\omega}{8\pi} \text{Im} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) E_i E_j^* \quad (7.8)$$

В кристаллах, не имеющих центра инверсии (Глава 1) выполняются соотношения

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) \neq \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, -\mathbf{H}) \quad (7.9)$$

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) \neq \varepsilon_{ij}(\omega, -\mathbf{k}, \mathbf{H}),$$

однако

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}) = \varepsilon_{ij}(\omega, -\mathbf{k}, -\mathbf{H}). \quad (7.10)$$

Следовательно, спектр поглощения зависит от взаимной ориентации волнового вектора света и магнитного поля. Это означает, что эффект пропорционален произведению волнового вектора света и магнитного поля. Эффект инверсии магнитного поля впервые наблюдался в работах [24, 18], микроскопические причины этого явления связаны со спин-орбитальным взаимодействием.

Эффект инверсии магнитного поля можно наблюдать не только в объемных кристаллах, но и в квантовых ямах.

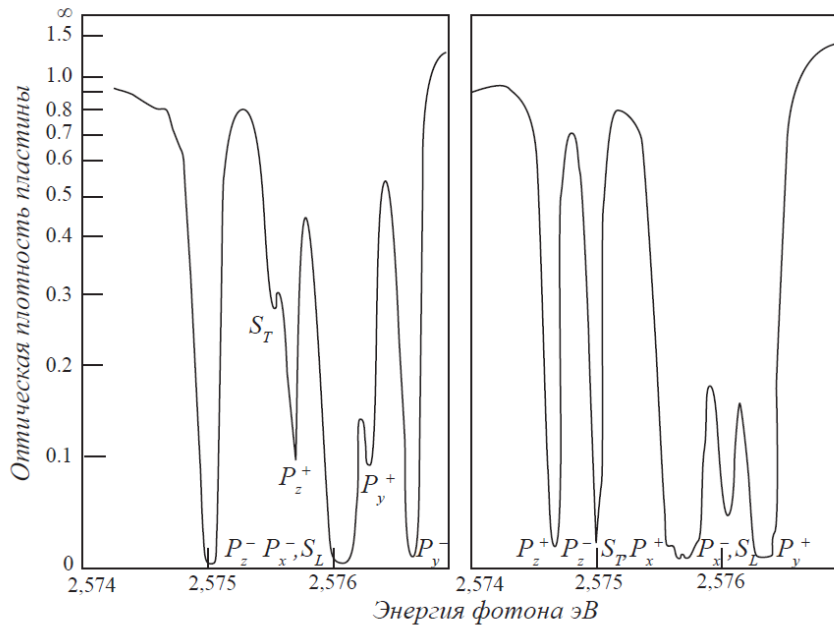


Рис 7.1. Эффект инверсии магнитного поля. Спектры пропускания кристалла CdS (из статьи D.G.Thomas, J.J. Hopfield Phys. Rev. Lett. V.5, 505 (1960)) снятые в геометрии Фогта $\mathbf{K} \perp \mathbf{H}$ для двух противоположных направлений магнитного поля а) H^+ , б) H^- .

7.2. Эффект взаимного магнито-индуцированного двулучепреломления в гексагональных кристаллах

Иногда этот эффект называют эффектом магнито-индуцированной пространственной дисперсии оптических осей кристалла (зависимость направления оптической оси кристалла от волнового вектора и магнитного поля), он впервые наблюдался в кристаллах CdS и CdSe [19, 25] и затем в кристаллах GaAs [20].

В кристаллах со структурой вюрцита (CdS, CdSe) в геометрии $\mathbf{k} \perp C_6$ а $\mathbf{H} \parallel C_6$ в области изотропной точки (где показатели преломления обыкновенного и необыкновенного лучей совпадают), наблюдался эффект индуцированного магнитным полем двулучепреломления. При этом величина и направление угла поворота оптической оси относительно направления магнитного поля зависит от величины и знака магнитного поля и волнового вектора.

Исследовались спектры пропускания $T = |t|^2$ в геометрии $\mathbf{H} \parallel C_6$ $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$ (C_6 гексагональная ось кристалла). Падающий свет был линейно поляризован вдоль или перпендикулярно оси C_6 : $\mathbf{P} \parallel C_6$ или $\mathbf{P} \perp C_6$. Измерялись интенсивность прошедшего света в линейной поляризации, перпендикулярной поляризации падающего света $\mathbf{P} \perp C_6$ или $\mathbf{P} \parallel C_6$: I_{\parallel}

, I_{\perp} , в циркулярной поляризации: I_{σ^+} , I_{σ^-} и линейной поляризации в осях повернутых на 45 градусов относительно поляризации падающего света: I_{+45} , I_{-45} .

В ортогональных поляризациях падающего и прошедшего света в отсутствие магнитного поля сигнал пропускания отсутствовал. При приложении магнитного поля $\mathbf{H} \parallel C_6$ наблюдалось появление пропускания (**Рисунок 7.2**).

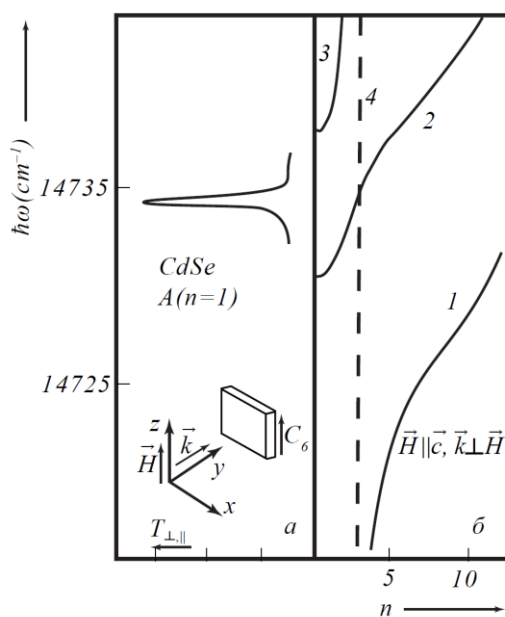


Рис 7.2. а) Спектр пропускания $T_{\perp \parallel}$ кристалла CdSe в скрещенных поляризаторах $\mathbf{P} \parallel C_6$, $\mathbf{A} \perp C_6$ в магнитном поле $H = 6T$ направленном вдоль оси C_6 . На вставке геометрия эксперимента. б) Дисперсионные кривые магнитополяритонов в окрестности экситонного резонанса $A(n=1)$ в кристалле CdSe. Сплошная кривая – дисперсия обыкновенной волны с поляризацией $\mathbf{E} \perp C_6$; Пунктир – дисперсия необыкновенной волны с поляризацией $\mathbf{E} \parallel C_6$

1). Спектр пропускания в ортогональных поляризациях падающего и прошедшего света представлен на **рисунке 7.2**. Сигнал пропускания имеет резонансный характер в области пересечения дисперсий обыкновенной и необыкновенной волн ω_{is} (*изотропная точка*). Величина сигнала в максимуме составляла $S = T_{\perp \parallel} / T_{\parallel \parallel} \approx 0.05$. (**Рисунок 7.3а**).

2). Когда падающий свет был линейно поляризован, прошедший через образец свет был поляризован эллиптически. Главная ось эллипса поляризации повернута относительно плоскости поляризации падающего света. Степень циркулярной поляризации $P_{cir} = \frac{I_{\sigma^+} - I_{\sigma^-}}{I_{\sigma^+} + I_{\sigma^-}}$ имеет максимум в изотропной точке, величина P_{cir} при $H = 6T$ составляет ≈ 0.4 (**Рисунок 7.3б**).

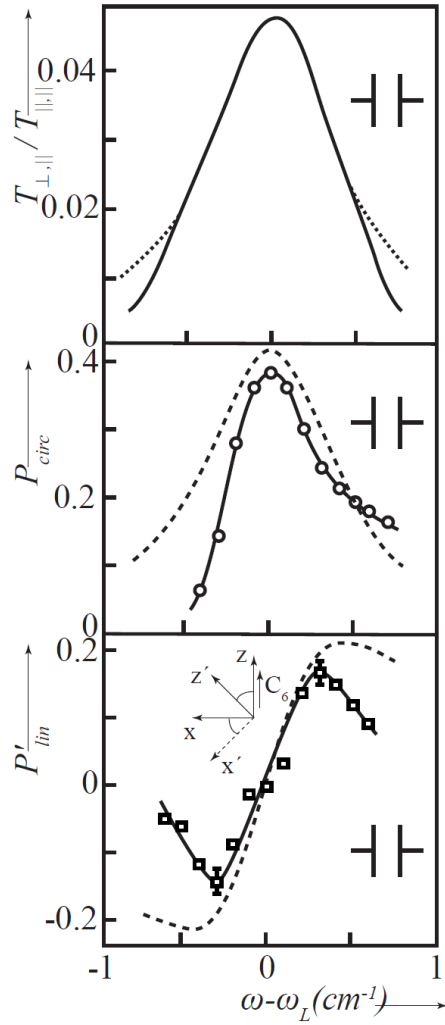


Рис 7.3. а) Отношение сигналов пропускания $T_{\perp,||} / T_{||,||}$ в скрещенных поляризаторах ($T_{\perp,||}$) и в параллельных поляризаторах ($T_{||,||}$) в окрестности изотропной точки (пересечение дисперсий обыкновенного и необыкновенного лучей) в магнитном поле $H = 6T$; б) Степень циркулярной поляризации P_{circ} прошедшего через образец света; в) Степень линейной поляризации P'_{lin} в осях z' , x' повернутых относительно осей z , x на 45 градусов (см. вставку).

$$P_{circ} = \frac{I_{\sigma^+} - I_{\sigma^-}}{I_{\sigma^+} + I_{\sigma^-}}, \quad P'_{lin} = \frac{I_{z'} - I_{x'}}{I_{z'} + I_{x'}}$$

3). Величина пропускания в ортогональных линейных поляризациях пропорциональна квадрату магнитного поля H^2 .

4). Смена знака магнитного поля на обратный приводит к смене знака циркулярной поляризации P_{cir} и не влияет на $T_{\perp\parallel}$ и $T_{\parallel\perp}$ (**Рисунок 7.3в**).

Эти данные указывают на то, что магнитное поле $\mathbf{H} \parallel C_6$ приводит к повороту оптической оси кристалла на угол

$$\varphi = \frac{1}{2} \arctg(P'_{lin} / P_{lin}), \quad (7.11)$$

где $P_{lin} = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}}$ - степень линейной поляризации света в осях x, z параллельных и

перпендикулярных гексагональной оси C_6 , $P'_{lin} = \frac{I_{+45} - I_{-45}}{I_{+45} + I_{-45}}$ степень линейной поляризации света

в осях повернутых на $\pm 45^\circ$ относительно осей x, z .

Рассмотрим вклад в тензор диэлектрической проницаемости слагаемых билинейных по магнитному полю и волновому вектору. Как следует из Глав 3, 4 и 5, (4.16) и (5.35) тензор диэлектрической проницаемости с учетом линейных по волновому вектору и магнитному полю слагаемых в гексагональном кристалле в геометрии $\mathbf{H} \parallel z \parallel C_6$ и $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$, $\mathbf{k} \parallel y$ имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp}(\omega) & i\theta H_z & AH_z k_y \\ -i\theta H_z & \varepsilon_{\perp}(\omega) & i\gamma k_y \\ AH_z k_y & -i\gamma k_y & \varepsilon_{\parallel}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (7.12)$$

Так как изучаются спектры пропускания при нормальном падении света, удобно перейти к поперечному тензору диэлектрической проницаемости (1.26):

$$\varepsilon_{\perp,xx} = \varepsilon_{\perp,zx} = A^{\perp} H_z^{(0)} k_y, \quad A^{\perp} = A + \frac{\theta\gamma}{\varepsilon_{xx}}, \quad (7.13)$$

$$\varepsilon_{\perp,xx} = \varepsilon_{xx} - \frac{(\theta H_z^{(0)})^2}{\varepsilon_{xx}}, \quad \varepsilon_{\perp,zz} = \varepsilon_{zz} - \frac{(\gamma k_y)^2}{\varepsilon_{xx}}.$$

Вклад в поперечный тензор $\varepsilon_{\perp,ij}$ вносят не только слагаемые пропорциональные произведению k и $H^{(0)}$ в разложении (2.3), но и линейные по полю и волновому вектору слагаемые описывающие эффект оптической активности и эффект Фарадея. Однако в исследуемой геометрии эксперимента сами по себе эти эффекты не проявляются. Когда $A^{\perp} \neq 0$, направления главных осей тензоров $\text{Re} \varepsilon_{\perp,ij}$ и $\text{Im} \varepsilon_{\perp,ij}$ зависят от величины волнового вектора. Следовательно, это явление естественно назвать как «*Магнито-индуцированная пространственная дисперсия оптических осей*».

Если $\text{Im} \varepsilon_{\perp,ii} \ll \text{Re} \varepsilon_{\perp,ii}$ то пользуясь (1.20) можно, используя теорию возмущений, получить:

$$n_{\perp}^2 \approx \varepsilon_{\perp,xx} + \frac{\varepsilon_{\perp,xz}^2}{\varepsilon_{\perp,xx} - \varepsilon_{\perp,zz}}, \quad (7.14)$$

$$n_{\parallel}^2 \approx \varepsilon_{\perp,zz} - \frac{\varepsilon_{\perp,xz}^2}{\varepsilon_{\perp,xx} - \varepsilon_{\perp,zz}}.$$

Отсюда видно, что при $A^{\perp} \neq 0$ имеет место двулучепреломление (Глава 3). Главной микроскопической причиной этого явления является смешивание в магнитном поле состояний экситона серии A , поляризованного перпендикулярно оптической оси кристалла, и экситона серии B , поляризованного вдоль оптической оси. Это смешивание определяется линейным по волновому вектору вкладом в дисперсию экситонов A, B .

7.3. Эффект не взаимного магнито-индуцированного двулучепреломления в кубических кристаллах с симметрией T_d .

В кубических кристаллах (GaAs) в геометрии $\mathbf{k} \parallel [110]$, $\mathbf{H} \parallel [1-10]$ также наблюдался эффект двулучепреломления индуцированного магнитным полем. Эксперимент проводился в скрещенных анализаторе $\mathbf{A} \parallel [1-10]$ и поляризаторе $\mathbf{P} \parallel [001]$.

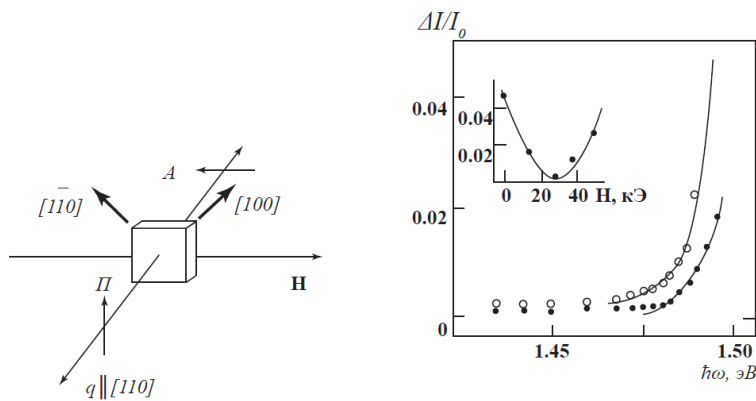


Рис 7.4. а) Схема эксперимента. Падающий луч направлен вдоль оси $[110]$ кристалла. Магнитное поле направлено вдоль оси $[1-10]$. Падающий луч поляризован вдоль оси $[001]$ детектировалась поляризация вдоль $[1-10]$. б) Относительная интенсивность света прошедшего через скрещенные поляризаторы $\frac{\Delta I(H)}{I_0}$, I_0 интенсивность падающего света. Пустые кружки – нулевое магнитное поле. Сплошные кружки – поле $H = 13T$. На вставке зависимость $\frac{\Delta I(H)}{I_0}$ от магнитного поля.

В нулевом магнитном поле в скрещенных поляризаторах наблюдалось двойное лучепреломление, обусловленное квадратичным по волновому вектору вкладом в тензор диэлектрической проницаемости (6.1). В магнитном поле величина дупреломления уменьшалась до нуля в поле 2.7 Т. При дальнейшем увеличении поля, дупреломление снова возрастало. Билинейный вклад в тензор диэлектрической проницаемости в этой геометрии выглядит как

$$\delta\epsilon_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & C_1[\mathbf{k} \times \mathbf{H}]_z & 0 \\ C_1[\mathbf{k} \times \mathbf{H}]_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.15)$$

Здесь оси x, y, z выбраны вдоль направлений $[100], [010], [001]$. Из самой формы тензора ϵ_{ij} видно, что в магнитном поле имеет место двойное лучепреломление вызванное пространственной дисперсией, с показателями преломления

$$n_{\pm}^2 = \epsilon^{(0)}(\omega) \pm C_1[\mathbf{k} \times \mathbf{H}]_z \quad (7.16)$$

Новые оптические оси кристалла в магнитном поле направлены вдоль кристаллографических осей $[110]$ и $[1-10]$. В результате этого, если падающий свет был поляризован вдоль $\mathbf{P} \parallel [001]$, то прошедший свет оказывается поляризованным эллиптически.

Микроскопической причиной этого явления является смешивание состояний тяжелого и легкого экситонов, вызванное магнитным полем и линейным по волновому вектору вкладом в дисперсию дырок. На первый взгляд это выглядит как эффект Фарадея в геометрии Фогта. Однако, как показывает детальный анализ, проведенный выше, в отличие от эффекта Фарадея, (циркулярного магнитного дупреломления) здесь имеет место линейное магнитное дупреломление.

7.4. Эффект четности в оптических спектрах экситонов в квантовых ямах

В оптических спектрах структур с квантовыми ямами недавно был обнаружен новый магнитнооптический эффект - «*эффект четности*». Этот эффект заключается в перераспределении силы осциллятора экситона от нечетных, к четным состояниям квантования центра масс и наоборот от четных к нечетным состояниям, в присутствии магнитного поля.

В широкой квантовой яме (КЯ) движение центра масс экситона квантуется в поперечном направлении (z). Состояния размерного квантования экситона определяется условием $k_z L = \pi n$, где L - ширина КЯ, k_z - волновой вектор, n - целое. Волновые функции этих квантованных состояний являются четными или нечетными по отношению к отражению в центре КЯ. В случае, если ширина КЯ удовлетворяет условию $k_z L = 2\pi n$, только четные состояния взаимодействуют со светом, если же $k_z L = \pi(2n+1)$, то только нечетные состояния являются оптически активными [26]. Это происходит из-за различного перекрытия волновых функций для разных уровней размерного квантования экситона и электромагнитного поля.

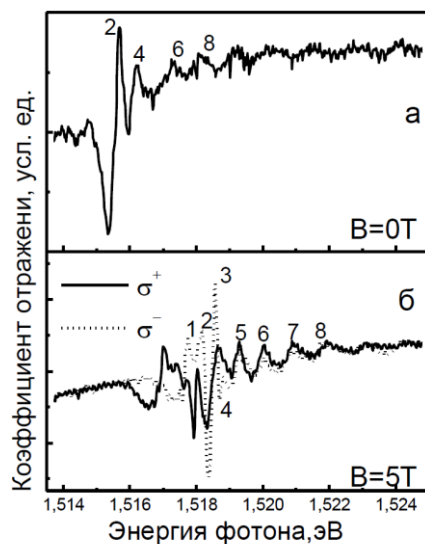


Рис 7.5. Спектры отражения КЯ GaAs/AlGaAs шириной 280 нм. Падающий свет линейно поляризован вдоль [100] и анализируется круговая поляризация отраженного света. Показаны номера экситонных состояний. а) в магнитном поле 0 Т, б) в магнитном поле 5 Т.

На рисунке 7.5а) в спектре отражения видны особенности, связанные с размерным квантованием движения экситонов как целого. В связи с тем, что толщина этой КЯ была такова, что выполняется условие $k_z L = 2\pi n$, в нулевом поле в спектре проявляются только четные состояния (рис.7.5а). В магнитном поле нечетные состояния квантования экситонов становятся наблюдаемыми в дополнение к четным состояниям (рис.7.5б). На рисунке 7.5б мы вычли зеемановское расщепление экситонных линий, чтобы подчеркнуть эффект четности.

В геометрии эксперимента $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H} \parallel z$, ось z вдоль направления [001]:

$$C_{ijk}^{(2)} H_k k_l = \begin{bmatrix} -C_2 H_z k_z & 0 & 0 \\ 0 & C_2 H_z k_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (7.17)$$

Очевидно, что эти слагаемые приводят к линейному двойному лучепреломлению, при этом главные оптические оси кристалла оказываются направленными вдоль кристаллографических осей [110] и [1-10]. Таким образом, если падающий свет поляризован вдоль оси [100], то отраженный свет и свет в спектре пропускания оказывается эллиптически поляризованным. Если же падающий свет поляризован вдоль [110] или [1-10], то он не меняет своей поляризации при отражении и пропускании. Именно это и наблюдается в эксперименте [21].

Для экситонных поляритонов условие квантования в терминах показателя преломления [27] запишется в виде

$$\frac{\omega}{c} \tilde{n} L = \pi n . \quad (7.18)$$

Из (7.17) видно, что в присутствии магнитного поля появляются поправки к условию квантования поляритонов. В результате условия наблюдения только четных $k_z L = 2\pi n$ или только нечетных $k_z L = \pi(2n+1)$ уровней нарушается, и в спектре проявляются уровни с разной четностью.

Для экситона с тяжелой дыркой, воспользовавшись результатами Приложения 2, можно показать, что

$$C_2 = BH_z k_z \frac{d}{3|E_{LH}^0 - E_{HH}^0|} , \quad (7.19)$$

где $E_{LH}^0 - E_{HH}^0$ - разность энергий тяжелого и легкого экситона, Величина B была рассчитана в статье [20].

$$B = \left(\frac{\gamma}{\gamma_1} \right)^2 \left(\frac{m_{hh}}{m_e + m_{hh}} \right) (\hbar \kappa_0) \left(\frac{\mu_0}{2Ry} \right) \sum_n \frac{\langle 1S | r / a_B | nP \rangle \langle nP | \nabla | 1S \rangle}{1 - 1/n^2} , \quad (7.20)$$

где κ_0 - коэффициент пропорциональный величине линейного по волновому вектору вклада в дисперсию экситона, μ_0 магнетон Бора, $\gamma_{0,1}$ - параметры Латтинжера, a_B борковский радиус экситона. Согласно данным [20] $B = 7.5 \cdot 10^{11}$ эВ·см·Т⁻¹.

Таким образом, в геометрии Фарадея можно, наблюдать линейное двойное лучепреломление.

8. Поправки к эффекту Фарадея и Фогта, связанные с пространственной дисперсией

Эти поправки были недавно детально исследованы для различных кристаллов и гетероструктур. Рассмотрим вклад в диэлектрический тензор пропорциональный квадрату волнового вектора экситона и первой и второй степеням магнитного поля $C_{ijklm}^{(3)}(\omega)k_k k_l H_m$ и $C_{ijklmn}^{(4)}(\omega)k_k k_l H_m H_n$. Общий вид этих тензоров для произвольного направления магнитного поля и волнового вектора довольно громоздкий. Из симметрии по отношению к инверсии времени (2.1) следует:

$$C_{ijklm}^{(3)} = -C_{jiklm}^{(3)} \text{ и } C_{ijklmn}^{(4)} = C_{jiklmn}^{(4)} .$$

Пользуясь замечанием сделанным во введении (В4), можно получить, что в тензоре диэлектрической проницаемости в геометрии Фарадея $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$ слагаемое $\sim k^2 H$ выглядят следующим образом:

$$\delta\varepsilon_{ij}(\omega, k^2, \mathbf{H}) = \begin{pmatrix} 0 & -C^{(3)}k_z^2 H_z & C^{(3)}k_y^2 H_y \\ C^{(3)}k_z^2 H_z & 0 & -C^{(3)}k_x^2 H_x \\ -C^{(3)}k_y^2 H_y & C^{(3)}k_x^2 H_x & 0 \end{pmatrix} . \quad (9.1)$$

При отсутствии поглощения параметр является $C^{(3)}$ чисто мнимым. Он был вычислен в статьях [28] для экситона в кубическом кристалле с вырожденной валентной зоной для геометрии $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H} \parallel [100]$. Разумеется, величина $C^{(3)}$ зависит от геометрии эксперимента. В других геометриях соответствующие величины могут быть получены аналогичным образом.

Сравнивая (5.19) и (9.1) видно, что тензор $C_{ijklm}^{(3)}(\omega)$ дает поправки к эффектам Фарадея и Зеемана. Как было показано в [28] эти поправки для основного состояния экситона могут оказаться намного больше вклада от слагаемых $A_{jl}^{(1)}(\omega)H_l$.

Вклад слагаемых $\sim k^2 H$ в зеemanовское расщепление основного состояния экситона представлен на рисунке 8.1 для разных структур с широкими квантовыми ямами на основе кубических полупроводников. На рисунке хорошо видно, что поправка к g -фактору экситона может достигать $g=6$ для экситонов с большими волновыми векторами. В то же время, g -фактор покоящегося экситона с $k=0$ не превосходит -0.5 в GaAs и, более того, может иметь обратный знак.

Микроскопическая природа этих поправок для экситона связана с тем, что в полупроводниках с вырожденной валентной зоной невозможно отделить внутреннее движение в экситоне от движения его центра масс. В результате к основному S -состоянию тяжелого экситона, у которого орбитальный момент равен нулю, подмешиваются возбужденные P -состояния легкого экситона. Можно получить следующее выражение для величины зеemanовского расщепления:

$$\Delta E = \mu_B g_{eff}(k) H_z , \quad (9.2)$$

$$g_{eff}(k) = 12 \left(\frac{\gamma^2}{m_0} \right) \left(\frac{m_{hh}}{m_e + m_{hh}} \right)^2 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{Ry} \right) \sum_n \frac{\langle 1S | r / a_B | nP \rangle \langle 1S | a_B \nabla | nP \rangle}{1 - 1/n^2 + \Delta(k)/Ry} \quad (9.3)$$

Здесь γ - параметр Латтинжера, m_{hh} - масса тяжелой дырки, a_B Боровский радиус экситона, Ry - экситонный Ридберг, k - волновой вектор экситона $\Delta(k)$ разность энергий легких и

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

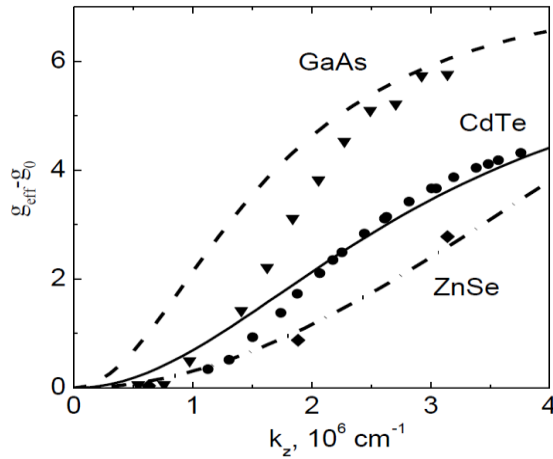


Рис 8.1 Поправки к эффекту Зеемана (к g - фактору) основного состояния экситона связанные с пространственной дисперсией в разных структурах с широкими (ширина ямы много больше боровского радиуса экситона) квантовыми ямами как функция волнового вектора экситона как целого k .

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:

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

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 $a_i(\mathbf{r}_m)$:

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

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 $\varphi_{i,k}(\mathbf{r}_m)$ заполненной зоны:

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

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]:

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

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:

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

Для триплетных состояний с полным спином равным 1.

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

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

$$\Phi_{\mathbf{k}_e, \mathbf{v}\mathbf{k}_h}^{(M)}$$

где: M равно нулю для синглетных состояний и равно 1 для триплетных состояний.

Тогда с учетом спина вместо (П1.11) получим:

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

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 $\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h = \mathbf{K}_{\text{exc}} = \text{const}$. Прямое вычисление дает:

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

Рассмотрим, сначала второе слагаемое в (П1.14)

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

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

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

где

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

В длинноволновом пределе, пренебрегая слабой зависимостью $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и $u_{\mathbf{v}\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 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:

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

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:

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

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:

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

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

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

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:

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

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:

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

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:

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

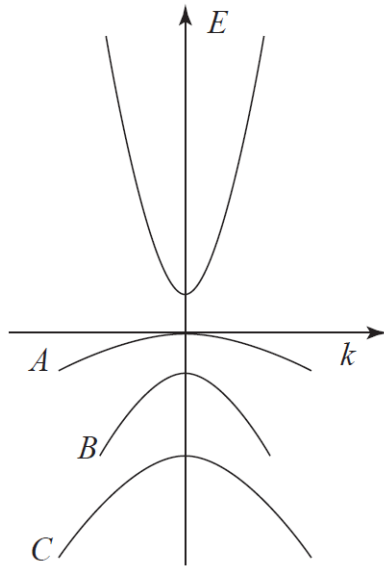


Рис П1.1. Схема зон в кристалле со структурой вюрцита вблизи Γ точки.

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:

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

Где $M_\alpha = m_{ea}^* + m_{ha}^* \quad \alpha = x, y, z$

Энергия экситона как целого в этом случае определяется выражением:

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

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 $\frac{1}{\mu_\alpha} = \frac{1}{m_\alpha^*} + \frac{1}{m_{h\alpha}}$ - 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

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

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:

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

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:

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

Здесь $H_c(-i\nabla_e)$ гамильтониан электрона в зоне проводимости:

$$\hat{H}_c(-i\nabla_e) = \hbar^2 \nabla_e^2 / 2m_e \quad (\text{П1.35})$$

$H_v(-i\nabla_h)$ гамильтониан Латтинжера дырок в валентной зоне. В сферическом приближении:

$$-\hat{H}_v(-i\nabla_h) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \nabla_h^2 \mathbf{I} - 2\gamma (\vec{J} \cdot \nabla_h)^2 \right], \quad (\text{П1.36})$$

где $\gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$, где $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ - параметры Латтинжера, m_e - эффективная масса электрона, \vec{J} - матрицы углового момента 3/2:

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ \sqrt{3/2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3/2} \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3/2} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\sqrt{3/2} \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_z = \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix}, \quad (\text{П1.37})$$

ε - статическая диэлектрическая проницаемость, \mathbf{I} - единичная матрица 4×4

Введем координаты центра масс и относительные координаты \mathbf{R} и \mathbf{r} , а также импульс центра масс и относительный импульс $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ используя линейное преобразование:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h & -i\hbar \nabla_e &= (\hat{\mathbf{p}} + \alpha \hat{\mathbf{P}}), \\ \mathbf{R} &= \alpha \mathbf{r}_e + \beta \mathbf{r}_h & -i\hbar \nabla_h &= (-\hat{\mathbf{p}} + \beta \hat{\mathbf{P}}). \end{aligned}$$

Здесь: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}_r$, $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \vec{\nabla}_R$.

Можно выбирать β и α более или менее произвольным образом. Попробуем найти такие значения β и α , чтобы разделить движение центра масс и внутреннее движение в экситоне. В классической механике это всегда возможно. Так как длина любого вектора должна сохраняться при любом пространственном преобразовании соответствующий детерминант должен быть равен единице, следовательно $\alpha + \beta = 1$.

Запишем гамильтониан (П1.30) в виде суммы трех слагаемых:

$$\hat{H} = \hat{H}_1(\mathbf{r}) + \hat{H}_2(\mathbf{R}) + \hat{H}_3(\mathbf{r}, \mathbf{R}),$$

$$\hat{H}_1(r) = \frac{1}{2m_e} \hat{\mathbf{p}}^2 \mathbf{I} + \frac{1}{2m_0} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \hat{\mathbf{p}}^2 \mathbf{I} - \frac{\gamma}{m_0} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \vec{J})^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r}|}, \quad (\text{П1.38})$$

$$\hat{H}_2(R) = \frac{\alpha^2}{2m_e} \hat{\mathbf{P}}^2 \mathbf{I} + \frac{\beta^2}{2m_0} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \hat{\mathbf{P}}^2 \mathbf{I} - \frac{\gamma}{m_0} \beta^2 (\hat{\mathbf{P}} \cdot \vec{J})^2, \quad (\text{П1.39})$$

$$\hat{H}_3(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{\alpha}{m_e} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{P}}) \mathbf{I} - \frac{\beta}{m_0} (\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma) (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{P}}) \mathbf{I} + \frac{\beta \gamma}{m_0} \{ (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) (\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \}. \quad (\text{П1.40})$$

Здесь: $\{\hat{A}\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ означает коммутатор операторов \hat{A} и \hat{B} .

Слагаемое (П1.38) описывает внутреннее движение в экситонах с тяжелой и легкой приведенной массой. Слагаемое (П1.39) описывает свободное движение центра масс тяжелого и легкого экситонов. Если бы не было слагаемого (П1.40), мы могли бы решить по отдельности задачу с гамильтонианом (П1.39) для неподвижного экситона, как это сделано в [29] и задачу с гамильтонианом (П1.39) для свободного движения центра масс экситона.

Коэффициенты β и α могут быть разными для разных координат. Это значит, что $\alpha + \beta$, в общем случае может быть тензором второго ранга [29]. Их можно выбирать более или менее произвольно [30]. Мы будем считать их скалярами.

Волновые функции уравнения (П1.34) выберем в виде:

$$\Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \varphi(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) \quad (\text{П1.41})$$

Для простоты положим $\alpha = 1$, $\beta = 0$. Это не самый удачный выбор, но он наиболее простой. Тогда получим

$$\hat{H}_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m_e} \hat{\mathbf{p}}^2 \mathbf{I} + \frac{1}{2m_0} (\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma) \hat{\mathbf{p}}^2 \mathbf{I} - \frac{\gamma}{m_0} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r}|}, \quad (\text{П1.42})$$

$$\hat{H}_2(\mathbf{R}) = \frac{\mathbf{K}^2}{2m_e}, \quad (\text{П1.43})$$

$$\hat{H}_3(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{K})}{m_e}. \quad (\text{П1.44})$$

Гамильтониан $\hat{H}_1(\mathbf{r})$ не зависящий от движения экситона как целого не зависит от выбора β и α и описывает состояния покоящегося экситона. Эта задача была решена в работе [29]. $\hat{H}_2(\mathbf{R})$ - описывает свободное движение экситона как целого. $\hat{H}_3(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ - смешанный член. Он описывает смешивание внутреннего движения в экситоне и движения его центра масс.

Волновая функция основного состояния покоящегося экситона представляет собой линейную комбинацию функций S и D типа. Благодаря $\hat{H}_3(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ к функции основного состояния подмешивается функции P типа.

В силу трансляционной инвариантности, центр масс экситона может свободно перемещаться по кристаллу, однако внутреннее движение в экситоне может зависеть от движения его центра масс. Яркий пример этого можно видеть в кубическом кристалле, где движение центра масс экситона приводит к смешиванию основного состояния экситона и возбужденных состояний P типа.

Пример 4 Волновые функции механического экситона:

Объемный кристалл:

$$\varphi_{\mathbf{K},i}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{\sqrt{N_{3d}}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} F_i(\mathbf{r}) u_{e\mathbf{K}}(\mathbf{r}_e) u_{h\mathbf{K}}(\mathbf{r}_h). \quad (\text{П1.51})$$

Здесь $F_i(\mathbf{r})$ - волновая функция относительного движения электрона и дырки, $u_{ek}(\mathbf{r}_e)$ и $u_{hk}(\mathbf{r}_h)$ - блоховские функции в соответствующих зонах, \mathbf{K} и \mathbf{R} - волновой вектор и координата центра масс экситона.

Квантовая яма:

$$\varphi_{\mathbf{K},i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_{2d}}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_n} f_i(\mathbf{p}) \psi_e(z_e) \psi_h(z_h) u_{ek}(\mathbf{r}_e) u_{hk}(\mathbf{r}_h) . \quad (\text{П1.52})$$

Здесь $f_i(\mathbf{p})$ - волновая функция относительного движения в i экситоне в плоскости квантовой ямы; огибающие волновые функции движения перпендикулярно плоскости ямы: $\psi_e(z_e)$ для электронов и $\psi_h(z_h)$ для дырок.

Квантовая точка:

$$\varphi_{\mathbf{K},i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_{0d}}} \psi_{ie}(\mathbf{r}_e) \psi_{ih}(\mathbf{r}_h) u_{ek}(\mathbf{r}_e) u_{hk}(\mathbf{r}_h) . \quad (\text{П1.53})$$

N_{3d} , N_{2d} , N_{0d} - нормировочные множители в трехмерном, двумерном и нульмерном случаях. В трехмерном случае экситон может возбуждаться в любой ячейке кристалла, и N_{3d} равен объему элементарной ячейки умноженному на число ячеек в кристалле [7]. В двумерном случае N_{2d} равен произведению ширины квантовой ямы на площадь кристалла [8]. В нульмерном случае N_{0d} равен объему квантовой точки.

Приложение 2. Экситонный вклад в тензор диэлектрической проницаемости

Как уже говорилось, экситоном мы называем возбужденное состояние электронной подсистемы кристалла. Это состояние принадлежит не отдельным атомам, а всему кристаллу. Экситон может родиться в любой точке кристалла. Поэтому оно дает заметный вклад в диэлектрический отклик.

Обозначим полный гамильтониан электронной подсистемы кристалла \hat{H}_e (П1.1). Основное состояние кристалла, в состоянии равновесия, когда все N электронов полностью заполняют валентную зону, как известно, можно описать с помощью многоэлектронной волновой функции $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, представляющей собой детерминант, составленный из одноэлектронных, например блоховских, функций (П1.3). Кристалл переходит в возбужденное состояние за счет возмущения, вызванного внешним электромагнитным полем \hat{H}_{er} . Возмущенное внешним полем состояние кристалла Φ_{exc} представим в виде $\Phi_{exc} = \Psi_0 + \Psi$, и подставим в уравнение Шредингера.

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_e \right] \Phi_{exc} = \hat{H}_{er} \Phi_{exc}, \quad (\text{П2.1})$$

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_e \right] \Psi_0 = 0. \quad (\text{П2.2})$$

Здесь $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ волновая функция всего кристалла, когда в нем возбужден экситон. Нам не нужно здесь конкретизировать ее вид и можем считать, что она выбрана в самом общем виде. Разложим Ψ по всем однодетерминантным состояниям кристалла $\Phi_{i,k_1,k_2}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, то есть по состояниям, представляющим собой детерминанты, составленные из одноэлектронных волновых функций в которых волновые функции валентной зоны одного из столбцов заменены на волновые функции зоны проводимости (П1.9).

Эти функции соответствуют состояниям скоррелированных электронно-дырочной пары, не связанной кулоновским взаимодействием. Для учета кулоновского взаимодействия следует брать линейные комбинации таких функций (П1.20).

В силу требований трансляционной инвариантности волновой функции, волновой вектор \mathbf{K} центра масс электрон-дырочной пары сохраняется. Таким образом, в линейную комбинацию детерминантов должны входить только функции с заданным \mathbf{K} :

$$\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2 = \mathbf{K}, \quad \Phi_{i,k_1,k_2}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N).$$

Тогда искомое разложение имеет вид:

$$\Phi_{exc} = \sum_i C_i(t, \mathbf{K}) \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (\text{П2.3})$$

Зависимость от времени отражает тот факт, что рассматриваемое состояние Φ_{exc} , в отличие от Ψ_0 , не является стационарным состоянием кристалла. Подставим функцию Φ_{exc} в (П2.1):

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_e \right] (\Psi_0 + \Psi) = \hat{H}_{er} (\Psi_0 + \Psi). \quad (\text{П2.4})$$

Считаем, что $\hat{H}_{er}\Psi$ мало по сравнению с $\hat{H}_{er}\Psi_0$, и учитывая (П2.1) получим,

$$\sum_i \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_e \right] C_i(t, \mathbf{K}) \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \hat{H}_{er}\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (\text{П2.5})$$

В приложении 1 было показано, что матричные элементы \hat{H}_e на функциях $\Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ представляют собой энергии механических экситонов.

Разложим $\hat{H}_{er}\Psi_0$ по полной системе состояний механического экситона

$$\left\{ \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \right\}:$$

$$\hat{H}_{er}\Psi_0 = \sum_i W_{\mathbf{K}, 0, i} \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (\text{П2.6})$$

$$W_{\mathbf{K}, 0, i} = \left\langle \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \left| \hat{H}_{er} \right| \Psi_0 \right\rangle.$$

Получаем систему уравнений

$$\sum_i \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_e \right] C_i(t, \mathbf{K}) \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i W_{\mathbf{K}, 0, i} \Phi_{i, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (\text{П2.7})$$

Оператор взаимодействия электромагнитного поля с электронной системой кристалла

$$\hat{H}_{er} = \frac{e}{mc} \sum_i (\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}_i), \quad (\text{П2.8})$$

Матричный элемент перехода кристалла из основного состояния в возбужденное имеет вид:

$$\begin{aligned} W_{\mathbf{K}, 0, i} &= \langle \Phi_{\mathbf{K}, i} | \hat{H}_{er} | \Psi_0 \rangle = \frac{e}{mc} \langle \Phi_{\mathbf{K}, i} | \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle = \frac{e}{mc} \left(-\frac{ic}{\omega} \right) \langle \Phi_{\mathbf{K}, i} | \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \frac{e}{mc} \left(-\frac{ic}{\omega} \right) \frac{i m \omega}{e} \langle \Phi_{\mathbf{K}, i} | \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{d}} | \Psi_0 \rangle = \langle \Phi_{\mathbf{K}, i} | \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{d}} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{П2.9})$$

Здесь использована связь матричного элемента импульса p_{nm} и матричного элемента дипольного момента d_{nm} : $p_{nm} = \frac{i\omega_{nm} m}{e} d_{nm}$, а также то, что $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = ik\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.

Иногда, например, в наноструктурах, следует учитывать нелокальность взаимодействия экситона и электромагнитного поля, в этом случае следует проинтегрировать скалярное произведение $(\mathbf{E} \cdot \mathbf{d})$ по объему кристалла

$$\hat{H}_{er} = \int \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{d}_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{П2.10})$$

Умножив уравнение (П2.7) слева на $\Phi_{i,k+\frac{1}{2}\mathbf{K},k-\frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ и интегрируя, получим:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_{ij} \right] C_i(t, \mathbf{K}) = \left\langle \Phi_{i,k+\frac{1}{2}\mathbf{K},k-\frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \left| \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{d}} \right| \Psi_0 \right\rangle, \quad (\text{П2.11})$$

где \hat{H}_{ij} матричные элементы гамильтониана механического экситона. В простейшем случае с учетом обменного взаимодействия и пространственной дисперсии имеем:

$$\hat{H}_{ij} = \left(\Delta_{exc}^i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{J} + \hbar \omega_i + \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2M_i} \right) \delta_{ij}. \quad (\text{П2.12})$$

Здесь ω_i - резонансные частоты механических (без учета взаимодействия с электромагнитным полем) экситонов, Δ_{exc}^i - константа обменного взаимодействия, $\boldsymbol{\sigma}$ и \mathbf{J} - спиновые матрицы зоны проводимости и валентной зоны соответственно, M_i - эффективная масса i - экситонного состояния, \mathbf{K} - его волновой вектор.

Фурье образ функции $C_i(t, \mathbf{K})$ представляет собой огибающую волновую функцию экситона в методе эффективной массы $\varphi_{\mathbf{K},i}(\mathbf{r})$.

Рассмотрим общее уравнение для объемного экситона (П2.11):

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_{ij} \right] C_i(t, \mathbf{K}) = \left\langle \Phi_{i,k+\frac{1}{2}\mathbf{K},k-\frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \left| \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{d}} \right| \Psi_0 \right\rangle$$

Учитывая малость волнового вектора света $\mathbf{K} = \mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h$ и используя волновые функции (П1.266) получим в правой части (П2.11):

$$\left\langle \Phi_{i,k+\frac{1}{2}\mathbf{K},k-\frac{1}{2}\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \left| \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{d}} \right| \Psi_0 \right\rangle = \frac{iep_{cv}}{\omega_0 m_0} F_i(0) E_0 \quad (\text{П2.13})$$

Здесь $F_i(0)$ величина волновой функции относительного движения при $|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| = 0$.

Уравнение (П2.13) для объемного экситона переписывается

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_{ij} \right] C_i(t, \mathbf{K}) = \frac{iep_{cv}}{\omega_0 m_0} F_i(0) E_0. \quad (\text{П2.14})$$

Переходя к Фурье-образам, получим систему уравнений для коэффициентов $C_i(\mathbf{K}, t)$:

$$\left[\hat{H}_{ij}(\mathbf{K}) - \hbar \omega_i \delta_{ij} \right] C_i(\omega, \mathbf{K}) = \mathbf{d}_i(\mathbf{K}) \cdot \mathbf{E}(\omega, \mathbf{K}). \quad (\text{П2.15})$$

Можно определить вектор поляризации \mathbf{P}_{exc} , связанный с возбуждением экситона:

$$\mathbf{P}^{exc} = \left\langle \Phi \left| \hat{\mathbf{d}}(r) \right| \Phi \right\rangle \approx \left\langle \Psi_0 \left| \hat{\mathbf{d}}(r) \right| \Psi \right\rangle = \sum_i C_i(\mathbf{K}, t) \varphi_{i,\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_i \mathbf{P}_i^{exc}. \quad (\text{П2.16})$$

Для вектора поляризации получим:

$$\left[\hat{H}_{ij}(\mathbf{K}) - \hbar\omega\delta_{ij} \right] P_i^{\text{exc}}(\omega, \mathbf{K}) = d_i(\mathbf{K}) \cdot d_j^*(\mathbf{K}) E_j(\omega, \mathbf{K}) . \quad (\text{П2.17})$$

Отсюда получаем выражение для тензора восприимчивости и тензора диэлектрической проницаемости для конкретной модели экситона

$$\chi_{ij}(\omega, \mathbf{K}) = \frac{d_i(\mathbf{K}) \cdot d_j^*(\mathbf{K})}{\omega_i(\mathbf{K}) - \omega - i\Gamma} \quad (\text{П2.18})$$

и

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{K}) = \varepsilon_0\delta_{ij} + 4\pi \frac{d_i(\mathbf{K}) \cdot d_j^*(\mathbf{K})}{\omega_i(\mathbf{K}) - \omega - i\Gamma} \quad (\text{П2.19})$$

Здесь ε_0 - фоновая диэлектрическая проницаемость на частоте экситонного резонанса, $\omega_i(\mathbf{K})$ - резонансные частоты экситонов, учитывающие квадратичную пространственную дисперсию, Γ - экситонное затухание, связанное с диссипативными процессами, $d_i(\mathbf{K})$ - дипольный матричный элемент оптического перехода в i экситонное состояние, индексы i и j включают в себя также и направление поляризации.

Литература

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц «Статистическая физика», Москва, Наука 1964 с.567
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц «Электродинамика сплошных сред», Москва, Наука 1992 с.661
3. Р. Нокс "Теория экситонов" Москва, Мир 1966, с.219
4. Ф. Бассани, Дж. Пастори Паравичини «Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах» Москва, Наука 1982, с.391
5. Г. Хаккен «Теория экситонов в кристаллах» УФН Т. **118**, с.565-616 (1959)
6. В.А. Киселев, А.Г. Жилич «Влияние обменного взаимодействия на экситонный спектр полупроводников» сб. Проблемы теоретической физики. Стр.165-181, Издательство Ленинградского Университета 1974
7. R.J. Elliott
«Intensity of Optical Absorption by Excitons»
Phys. Rev.108, 1384-1389 (1957)
8. J. Feldmann, G. Peter, E.O. Göbel, P. Dawson, K. Moore, C. Foxon, and R.J. Elliott
«Linewidth dependence of radiative exciton lifetimes in quantum wells»
Phys. Rev. Lett. 59, 2337 –2340 (1987)
9. Ю.И. Сиротин и М.П. Шаскольская «Основы кристаллофизики» Москва, Наука 1979, с.680
10. В.А.Кизель, В.И.Бурков «Гиротропия кристаллов» Москва, Наука 1980 с.303
11. Е.Л.Ивченко, А.В.Селькин
«Естественная оптическая активность в полупроводниках со структурой вюрцита» ЖЭТФ 766
1837-1854 (1979)
12. Yu. A. Bychkov, E. I. Rashba
«Effect of k -Linear Terms on Electronic Properties of 2D Systems»
Proceedings of the 17th International Conference on the Physics of Semiconductors
pp 321-324 (1985);
Dykman I.M., Rosenbaum V.M., Vasko F.T.
«HOT ELECTRONS IN SEMICONDUCTORS WITH QUASI-RELATIVISTIC BAND STRUCTURE».
Physica Status Solidi (B) V. 88, № 2, pp.385-395 (1978)
- 13 М. О. Nestoklon, L. E. Golub, and E. L. Ivchenko
«Spin and valley-orbit splittings in SiGe/Si heterostructures»
Phys. Rev. B 73, pp.2353341-2353347 (2006)
14. K. Cho, S. Suga, W. Dreybrodt, F. Willmann «Theory of degenerate 1S excitons in zinc-blend-type crystals in a magnetic field: Exchange interaction and cubic anisotropy» . PRB 11, 1512-1521 (1975)
15. Р.П.Сейсян «Спектроскопия диамагнитных экситонов» Наука, 1984, с.272
16. Г.Е. Бир и Г.Е. Пикус «Симметрии деформационные эффекты в полупроводниках» Москва, Наука, 1972 с.584
17. Е.Ф. Гросс, А.А. Каплянский
«Оптическая анизотропия кубических кристаллов, вызванная явлением пространственной дисперсии. Квадрупольное экситонное поглощение света в закиси меди»
ДАН СССР, Т.132, с.98- 103 (1960)
18. Е.Ф. Гросс, Б.П. Захарченя, О.В. Константинов
«Эффект инверсии магнитного поля в спектре экситонного поглощения кристалла CdS»
ФТТ Т.3, с305-309 (1961)
19. Ивченко Е.Л., Кочерешко В.П., Михайлов Г.В., Уральцев И.Н.
«Магнитоиндуцированная пространственная дисперсия кристаллов в экситонной области спектра» Письма в ЖЭТФ Т.37, №3, стр. 137-139 (1983)
20. О.В. Гоголин, В.А. Цветков, Е.Г. Цицишвили
«Магнитоиндуцированное двуупреомление в кубических кристаллах»
ЖЭТФ 87, 1038-1045 (1984)

- 21.** Kochereshko V.; Kats, V.; Platonov A.; Sapega V.; Besombes L.; Wolverson D.; Mariette H. «*Nonreciprocal magneto-optical effects in quantum wells*» Phys. Status Solidi C Curr. Top. Solid State Phys., v. **11**, №7-8, pp.1316-1319 (2014);
 Кочерешко В.П.; Кац В.Н.; Платонов А.В.
 «*Эффект магнитоиндуцированной пространственной дисперсии в квантовых ямах*» Изв. РАН, сер. физ., Т. **78**, 12 стр.1649-1652 (2014)
- 22.** В.М. Агранович и В.Л. Гинзбург «Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов» Москва, Наука 1965 с.374
- 23.** Кочерешко В.П., Михайлов Г.В., Уральцев И.Н.
 «*Эффекты инверсии магнитного поля на поляритонах*» Физика Твердого Тела Т.25, стр. 769-776 (1983)
- 24.** D.G. Thomas and J.J. Hopfield
 «*Direct observation of exciton motion in CdS*» Phys. Rev. Lett. V.5, 505 (1960)
- 25.** Ivchenko E.L., Kochereshko V.P., Mikhailov G.V., Uraltsev I.N.
 «*Resonance magneto-spatial dispersion in crystals*» Phys. Stat. Sol. (b), V.122, pp.221-230 (1984)
- 26.** Y. Merle d'Aubigne, Le Si Dang, A. Wasiela, N. Magnea, F. d'Albo and A. Million
 «*Quantization of Excitonic Polaritons in CdTe-CdZnTe double heterostructures*» Journal de Physique. Colloque C5, V.48, C.363-366 (1987)
- 27.** V.A. Kiselev, B.S. Razbirin, I.N. Uraltsev
 «*Additional waves and Fabri-Perot interference of photoexcitons (polaritons) in thin II-VI crystals*» Phys. Stat. Solidi (b) 72, p.161-172 (1975)
- 28.** J.J. Davies, D. Wolverson, V.P. Kochereshko, A.V. Platonov, R.T. Cox, J. Cibert, H. Mariette, C. Bodin, and C. Gourgon, E.V. Ubyivovk, Yu. P. Efimov, S. A. Eliseev
 «*Motional enhancement of exciton magnetic moments in zincblend semiconductors*» Phys. Rev. Lett. 97, pp.1874031-1874034 (2006);
 L.C. Smith, J.J. Davies, D. Wolverson, S. Crampin, R.T. Cox, J. Cibert, H. Mariette, V.P. Kochereshko, M. Wiater, G. Karczewski, and T. Wojtowicz
 «*Motion-dependent magnetic properties of excitons in CdTe*» Phys. Rev. B78, pp.0852041-08520413 (2008);
 Davies J.J.; Smith L.C.; Wolverson D.; Gust A.; Kruse C.; Hommel D.; Kochereshko V.P.
 «*Motion-enhanced magnetic moments of excitons in ZnSe*» Phys. Rev. B81, №8, pp.0852081-0852085 (2010);
 Smith L.C.; Davies J.J.; Wolverson D.; Boukari H.; Mariette H.; Kochereshko V.P.; Phillips R.T.
 «*Wave-vector dependence of magnetic properties of excitons in ZnTe*» Phys. Rev. B83, pp.1552061-1552066 (2011)
- 29.** A. Baldereschi and N. Lipari «*Energy Levels of Direct Excitons in Semiconductors with Degenerate Bands*» Phys. Rev. B3, 439 (1971)
- 30.** A. Siarkos, E. Runge, R. Zimmermann «*Center-of-mass properties of the exciton in quantum wells*» Phys. Rev. B61, 10854 (2000)
- 31.** K. Cho, S. Suga, W. Deybrodt, F. Willmann «*Theory of degenerate 1s excitons in zinc-blende-type crystals in a magnetic field: Exchange interaction and cubic anisotropy*» Phys. Rev. **B11**, 1512 (1975)