

ЭКСИТОННЫЕ ПОЛЯРИТОНЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Ал. Г. Алексанян, Н. А. Алексанян, Г. С. Никогосян

В работе рассмотрена задача квантования экситонных поляритонов в полупроводниковой сферической квантовой точке, в условиях слабого квантования $R_0 \gg a_b$. Представление решения уравнения для экситонных поляритонов в виде разложения по полной системе водородных волновых функций относительного движения дает возможность учета влияния границы квантовой точки.

Полученные решения позволяют в дальнейшем производить оценку влияния границы квантовой точки на формирование таких макроскопических величин, как поляризация, коэффициент поглощения и т. д..

1. Введение

В полупроводниковых структурах с пониженной размерностью влияние размерного квантования позволяет изучать экситоны с ненулевой кинетической энергией. Наиболее удобными объектами исследований при этом являются гетероструктуры с широкими квантовыми ямами, где ширина ямы намного превосходит боровский радиус экситона a_b [1], а также квантованные нанокристаллы в предельном случае слабого квантования $R_0 \gg a_b$, где R_0 радиус нанокристалла. В подобных структурах движение центра масс экситона квантуется, так что сохраняя свои объемные свойства, экситон обладает также ненулевой кинетической энергией, что приводит к необходимости учета пространственной дисперсии в области экситонного резонанса. А наличие последней требует введение дополнительных граничных условий (ДГУ), которые необходимы для детальных исследований спектров отражения [2].

В описанной ситуации кроме указанных особенностей, которое подлежат исследованию, можно отметить необходимость рассмотрения возможных явлений, обусловленные смешиванием состояний внутреннего движения в экситоне и его трансляционного движения, а также важность учета внешних воздействий над экситонными спектрами. Подобного рода рассмотрения, в частности в структуре Cd Te/Cd ZnTe с широкой квантовой ямой в магнитном поле, проведены в [1].

Далее учет пространственной дисперсии экситонов и светоэкситонного взаимодействия рассматриваются на основе модели полупроводниковой квантовой точки, и притом, в отличие от стандартного подхода, рассмотрение проводится путем внедрения полуклассических волновых уравнений, приводящих к поляритонным решениям, которые более целесообразны в задачах отыскания решений при краевых условиях [3-5]. Как известно, полные решения задачи об отражении света от полупроводников, частота которого попадает в область частот экситонных состояний, связано с осложнениями, как экспериментального, так и теоретического характера. В частности исследования отражения света связывается с необходимостью рассмотрения таких возбужденных состояний полупроводникового кристалла, которые создаются самим падающим светом. Например, в области высоких частот в ионных, молекулярных кристаллах и особенно в некоторых полупроводниках основную роль играют возбуждения электронного типа (атомные или молекулярные возбуждения, которые мигрируют по кристаллу, благодаря межатомным взаимодействиям, перехода от узла к узлу (экситоны Френкеля), или движущиеся в кристалле связанные пары электрон-дырка (экситоны Ванье-Мотта), когда область возбуждения распространяется на большое число элементарных ячеек). Так что, даже в случае идеальной отражающей поверхности, при анализе спектров отражения, существуют осложнения в связи с тем обстоятельством, что экситоны склонны к проявлению пространственной дисперсии [2] (в области экситонных частот компоненты $\epsilon_{ij}(\omega, \vec{k})$ комплексного тензора диэлектрической проницаемости среды зависят от волнового вектора $\vec{k} = \vec{k}_{\text{экс}}$ так как в поле светового излучения с частотой ω и

волновым вектором $\vec{k}$ могут возникнуть только синглетные экситоны с собственным волновым вектором $\vec{k}_{\text{экс}} = \vec{k}$:

Теоретическое вычисление тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \vec{k})$ определяется типом кристалла и природой рассматриваемых возбуждений.

В предположении, что поперечное электромагнитное поле падающего излучения заключено в объеме кристалла и удовлетворяет тем же краевым условиям, что и экситоны и в приближении отсутствия взаимодействия последних с фононной подсистемой кристаллической решетки, экситоны с волновым вектором $\vec{k}_{\text{экс}}$ взаимодействуют с фотонами, имеющими тот же волновой вектор $\vec{k} = \vec{k}_{\text{экс}}$ и в результате формируются новые элементарные возбуждения (стационарные состояния с тем же волновым вектором $\vec{k}$), которых называют светоэкситонами или экситонными поляритонами. Последние описываются определенной дисперсией, обладают волновым вектором и средним временем жизни.

В терминах микроскопической поляритоны возникают в результате диагонализации гамильтониана кристалла, равного сумме гамильтонианов экситонов, фотонов и гамильтониана их взаимодействия.

Учет пространственной дисперсии равносильно утверждению существования в кристалле вторичного механизма переноса энергии, отличного от электромагнитной волны. Так что рассмотрение поляритонных решений является источником дополнительной информации в кристаллооптике. Характерным является формирование новых поляритонных мод, их интерференция, приводящее к осцилляции коэффициента отражения [1, 6]. С целью оценки последних и возникает необходимость феноменологического введения дополнительных граничных условий (ДГУ), которые делают задачу отражения вполне определенной. Характер ДГУ определяется физическими свойствами среды и ее поверхности и, следовательно, их выбор не однозначен. При этом, для ДГУ необходимо учитывать наличие на поверхности кристалла некоторого переходного слоя толщины d , оптические свойства которого отличаются от таковых в объеме. В частности, эти свойства зависят от технологии изготовления образца и химических процессов на поверхности.

Отметим, что толщина d переходного слоя выступает в качестве феноменологического параметра. Т.е. особенности контура экситонного отражения света во многом связано с правильным пониманием структуры переходного слоя.

В работах [3-5] предлагается своеобразный подход с применением полуклассических волновых уравнений, описывающих взаимодействия электронно-дырочных пар с электромагнитным излучением. Подобная, более реалистическая поляритонная концепция основывается на дифференциальных уравнениях в конфигурационном пространстве, которые предпочтительны в вопросах рассмотрения краевых задач для электронно-дырочного континуума. Другими словами предлагаемый подход наиболее приспособлен для рассмотрения экситонных граничных состояний в потенциальной яме полупроводниковой квантовой точки с бесконечно высокими стенками.

2. Полуклассические уравнения экситонных поляритонов.

В оптических экспериментах кристаллическая система обычно переходит в состояние когерентного макроскопического возбуждения и взаимодействия электронных возбуждений с поперечным электромагнитным полем формируют поляритонные элементарные образования. С электронными возбуждениями заметно взаимодействуют лишь длинноволновые фотоны ($|\vec{k}|a \ll 1$, a - постоянная кристаллической решетки). Так что, в рассматриваемой ситуации применима полуклассическая модель динамики носителей заряда, когда внешние, медленно меняющиеся поля в уравнениях эволюции волнового пакета возбужденного состояния кристалла обуславливают классическое воздействие в виде обычных сил [7]. А, так как характерная длина изменения периодического кристаллического потенциала мала по сравнению с шириной волнового пакета, то такой потенциал рассматривается не классически, притом закон дисперсии носителей зарядов, в приближении эффективной массы, считается известным.

Ниже применяется формализм вторичного квантования для модели полупроводника с изотропными невырожденными зонами с параболической дисперсией и прямой энергической щелью в критической точке $k_c = 0$, когда $m_e \ll m_h$ [8].

Волновую функцию возбужденного состояния кристалла представим в виде разложения [9]

$$\psi^{(e-h)} = \sum_{\vec{K}} B(\vec{K}) \cdot \phi_{\vec{K} + \frac{m_e^*}{M} \vec{K}_0, \vec{K} - \frac{m_e^*}{M} \vec{K}_0} \quad (1)$$

где $\phi_{\vec{K}_i \vec{K}_j}$ – базисная функция возбужденного состояния, представленная в виде детерминанта Слэтера из одноэлектронных блоховских функций $\psi_{n\vec{k}}$. Она отличается от детерминантной волновой функции заполненной валентной зоны заменой $\psi_{v\vec{K}_j} \rightarrow \psi_{c\vec{K}_i}$. Здесь $\vec{K}_0$ – полный волновой вектор электрон-дырочной пары $(\vec{K}_i, \vec{K}_j)$, $\vec{K}$ – волновой вектор относительного движения.

Вектор электрон-дырочного состояния (1) в представлении вторичного квантования

$$\psi^{(e-h)} = \sum_{\vec{K}} B(\vec{K}) \alpha_{\vec{K}_i}^+ \beta_{\vec{K}_j}^+ |0\rangle_{uc}. \quad (2)$$

Соответствующий одночастичный оператор рождения, одновременно рождающий электрон в зоне проводимости и дырку в валентной зоне

$$B^+ = \sum_{\vec{K}} B(\vec{K}) \alpha_{\vec{K}_i}^+ \beta_{\vec{K}_j}^+ \quad (3)$$

Эрмитово сопряжение от (3) дает соответствующий оператор уничтожения

$$B = \sum_{\vec{K}} B^*(\vec{K}) \beta_{\vec{K}_j} \alpha_{\vec{K}_i} \quad (4)$$

$\beta^+ \beta$ – операторы рождения и уничтожения дырок в валентной зоне, $\alpha^+ \alpha$ – соответствующие операторы для электрона в зоне проводимости, а суммирование в (3), (4) выполняется по всем возможным состояниям. Низкоэнергетические электронно-дырочные возбуждения основного состояния кристалла (экситонные поляритоны), возникающие при поглощении фотона, приближенно стационарны и их можно рассматривать как совокупность слабо взаимодействующих «квазичастиц», к которым можно применить метод уравнения движения [10] [11]. Т. е. задача заключается в отыскании операторов (3), (4), удовлетворяющие операторному уравнению движения

$$[H_0 + H_1 + V_{кул}^{(e-h)}, B^+] |0\rangle_{uc} = \varepsilon B^+ |0\rangle_{uc}. \quad (5)$$

а также возможные значения энергии возбуждения $\varepsilon = \hbar\omega$ (дисперсионное соотношение экситонных поляритонов), отсчитанная от основного состояния с волновой функцией $|0\rangle_{uc}$. (волновая функция «условно вакуумного» состояния невозмущенного кристалла), где

$$H_0 = \int \hat{\Psi}^+ \hat{H} \Psi \alpha \xi, \quad (6)$$

гамильтониан системы электронов в представлении вторичного квантования, $\hat{H}$ – одноэлектронный гамильтониан кристалла в представлении Шредингера, включающий двухчастичное кулоновское и обменное взаимодействие между зарядами,

$$H_1 = - \int (\vec{E} \cdot \vec{P}) d\vec{r}' \quad (7)$$

гамильтониан локального макроскопического взаимодействия между «классическим» световым полем и межзонным переходом, который характерен для локализованных электрических диполей $\vec{P}$ в квазистатическом поле $\vec{E}(\vec{r}')$ с пространственной зависимостью $\vec{r}'$. Подобное представление

оправдано для слабо-возбужденных кристаллических систем, содержащие электронно-дырочные пары с неперекрывающимися волновыми функциями.

Оно отражает отклик электронов к излучениям ($\lambda \sim 10^{-4}$) см, вызывающие межзонные переходы в полупроводниковом кристалле, когда можно воспользоваться электрическим дипольным приближением, применимость которого не противопоказана в условиях обязательного использования метода эффективной массы ($\lambda > a$) [4].

$$V_{\text{кул}}^{(e-h)} = \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(\xi) \hat{\psi}^+(\xi') V_{\text{кул.}}^{(e-h)}(\xi, \xi') \hat{\psi}(\xi') \hat{\psi}(\xi) d\xi d\xi' \quad (8)$$

оператор кулоновского взаимодействия ($e - h$) пары в представлении вторичного квантования.

Дипольный электрический момент межзонного перехода в представлении вторичного квантования

$$\vec{P} = \int \hat{\psi}^+ e \xi \hat{\psi} d\xi \quad (9)$$

В рассматриваемой модели экситонного поляритона формирующийся при одноэлектронном переходе, пренебрегается смешивание возбужденных состояний и корреляционная поправка электронно-дырочного взаимодействия к разности хартри-фоковских энергий основного и возбужденного состояний кристалла. При этом оправдан переход к «дырочному представлению», который достигается разложением операторных функций $\hat{\psi}$ по системе собственных функций $\psi_{c\vec{k}, v\vec{k}}$ оператора $\hat{H}$ в представлении Блоха, составляющая хартри-фоковский базис одночастичных состояний и диагонализующий одночастичный гамильтониан

$$\hat{\psi} = \hat{\psi}_c + \hat{\psi}_v = \sum_e \alpha_e \psi_{c\vec{k}} + \sum_h \beta_h^+ \psi_{v\vec{k}} \quad (10)$$

Операторное уравнение (5) допускает приближенные решения как в представлении квазиимпульса, в схеме расширенных зон, определяющие энергии элементарных возбуждений и неизвестные коэффициенты $B(\vec{K})$, а также в конфигурационном пространстве, для фурье-образа функции $B(\vec{K})$. Включение Глена кулоновского взаимодействия $V_{\text{кул}}^{(e-h)}$ проведено в [5].

В данном рассмотрении определяющими являются вычисления коммутаторов

$$[H_0 B^+] = \sum_{\vec{K}} \varepsilon_{\vec{K}_e} B(\vec{K}) \delta_{\vec{K}_e \vec{K}_i} \alpha_{\vec{K}_e}^+ \beta_{\vec{K}_j}^+ - \sum_{\vec{K}} \varepsilon_{\vec{K}_h} B(\vec{K}) \delta_{\vec{K}_h \vec{K}_j} \alpha_{\vec{K}_i}^+ \beta_{\vec{K}_h}^+ \quad (11a)$$

$$[H_1, B^+] = - \int E \sum_{\vec{K}} B(\vec{K}) \left(M_{\vec{K}_e \vec{K}_e'} \cdot \delta_{\vec{K}_e' \vec{K}_i} \cdot \alpha_{\vec{K}_e}^+ \beta_{\vec{K}_j}^+ + M_{\vec{K}_h \vec{K}_e'} \left[\delta_{\vec{K}_e' \vec{K}_i} \cdot \delta_{\vec{K}_h \vec{K}_j} \right] - M_{\vec{K}_h \vec{K}_h'} \cdot \delta_{\vec{K}_h \vec{K}_j} \cdot \alpha_{\vec{K}_i}^+ \beta_{\vec{K}_h'}^+ \right) d\vec{r}' \quad (11b)$$

С целью решения задачи об энергическом спектре отыскиваемых элементарных возбуждений, линеаризуем уравнение движения (5) в приближений хаотических фаз, сохранив лишь когерентные операторные слагаемые, т.е. члены взаимодействия, не связанные с возбуждением других композитных состояний, кроме состояния $(\vec{K}_i \vec{K}_j)$, доминирующее в (1). Отбрасываются также члены, у которых комбинации операторов рождения и уничтожения отвечают фурье-компонентам операторов плотности система электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне, т.е. члены $\beta_{\vec{K}_j}^+ \beta_{\vec{K}_h}$; $\alpha_{\vec{K}_i}^+ \alpha_{\vec{K}_e'}$, выражающиеся в терминах «коллективных» координат и тем самым описывающие вклад коллективных возбуждений (волновые моды плазменных колебаний в виде геликонов или альфвеновских волн), которыми можно пренебречь в данном рассмотрении [10]. Линеаризация (11b) приводит к результату

$$[H_1 B^+] = - \int E \sum_{\vec{K}} B(\vec{K}) \cdot M_{\vec{K}_j \vec{K}_i} d\vec{r}' \quad (12)$$

В силу линейной независимости операторных членов $\alpha_{\vec{K}_i}^+ \beta_{\vec{K}_j}^+$ уравнение движения (5) преобразуется к виду

$$\left(\varepsilon_{\vec{K}_i} - \varepsilon_{\vec{K}_j} + V_K - \varepsilon \right) B(\vec{K}) \cdot \alpha_{\vec{K}_i}^+ \beta_{\vec{K}_j}^+ |0\rangle_{\text{yc}} = \int E B(\vec{K}) M_{\vec{K}_j \vec{K}_i} d\vec{r} \cdot |0\rangle_{\text{yc}}. \quad (13)$$

где $\varepsilon = \hbar\omega - E_g$, $M_{\vec{K}_j \vec{K}_i} = e\psi_{\vec{K}_j} r \psi_{\vec{K}_i}$ - дипольная плотность перехода,

$$V_K = \langle \psi_{\vec{K}_i} \psi_{\vec{K}_j} \left| \frac{e^2}{r_{ij}} \right| \psi_{\vec{K}_j} \psi_{\vec{K}_i} \rangle - \langle \psi_{\vec{K}_i} \psi_{\vec{K}_j} \left| \frac{e^2}{r_{ij}} \right| \psi_{\vec{K}_i} \psi_{\vec{K}_j} \rangle \quad (14)$$

двухчастичный матричный элемент кулоновского взаимодействия электронно-дырочной пары.

Член в правой части (13), играющий роль источника поляритонного возбуждения, достигает преобладающего значения лишь при фиксированном значении волнового вектора падающего излучения $\vec{K} = \vec{K}_{\text{экс}}$, которую условно можно принимать за начало отсчета в пространстве квазиволнового вектора. Так что в правой части (13) коэффициент разложения $B(\vec{K})$ можно заменить дельта-функцией Дирака:

$$B(\vec{K}) \rightarrow \delta(\vec{K} - \vec{K}_{\text{экс}}) = \delta(\vec{K}) \quad (15)$$

Преобразуем также пробную волновую функцию возбужденного состояния в (13), записанное в операторном представлении. В итоге, в приближении эффективной массы, уравнение (13) запишется в виде

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\vec{K} + \frac{m_e^*}{M} \vec{K}_{\text{экс}} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \left(\vec{K} - \frac{m_h^*}{M} \vec{K}_{\text{экс}} \right)^2 + E_g - \hbar\omega + V_K \right] B(\vec{K}) \psi_{\vec{K}_i} \hat{T} \psi_{\vec{K}_j} = \int E \delta(\vec{K}) M_{\vec{K}_j \vec{K}_i} d\vec{r}' \quad (16)$$

где $\hat{T}$ - оператор обращения времени.

Условия разрешимости системы (16) решают задачу об энергетическом спектре поляритонных состояний. Однако, в действительности, порядок секулярного детерминанта в зоне Бриллюэна столь высок, что целесообразнее аппроксимировать систему (16) дифференциальным уравнением для фурье-образа $B(\vec{K})$

$$B(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} B(\vec{K}) e^{i\vec{K}\vec{r}}, \quad (17)$$

одновременно, применяя приближения для V_K , из [9]. С этой целью умножим обе части (16) на $e^{i\vec{K}\vec{r}}$ и интегрируем по $\vec{K}$, формально расширив область интегрирования до бесконечности. Получим

$$\left(E_g - \hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2\mu^*} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) B(\vec{r}, \vec{R}) = \int \frac{E M_{\vec{K}_j \vec{K}_i}(k=0)}{\psi_c(\vec{K}=0) \psi_v(\vec{K}=0)} d\vec{r}' \quad (18)$$

Чтобы подчеркнуть доминирующую роль источника в правой части (18), при образовании поляритонных возбуждений, применим приближение

$$M_{\vec{K}_j \vec{K}_i} \rightarrow \delta(\vec{r}' - \vec{R}) M(\vec{r}), \quad (19)$$

$$\vec{r}' = \vec{r}_e - \vec{r}_h, \quad \vec{R} = \frac{m_e^* \vec{r}_e - m_h^* \vec{r}_h}{m_e^* + m_h^*}, \quad \mu^* = \frac{m_e^* m_h^*}{M^*}, \quad M^* = m_e^* + m_h^*,$$

где $\vec{r}'$ и $\vec{R}$ «координаты» фотона и электронно-дырочной пары соответственно [4].

Этим завершается формирование дифференциального уравнения экситонных поляритонов в рамках принятых приближений,

$$\left(E_g - \hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2\mu^*} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) B(\vec{r}, \vec{R}) = E(\vec{R}) M(\vec{r}), \quad [3,4,5] \quad (20)$$

которое подлежит интегрированию при определенных краевых условиях. (Правая часть (20) записана с точностью постоянного множителя

$$g = \psi_c(\vec{K} = 0) \cdot \psi_v(\vec{K} = 0).$$

$M(r)$ -является заданной функцией, коль скоро известна зонная структура, так что дальнейшее рассмотрение возможно обсуждаться лишь в том случае, когда конкретизирован вид функции $M(\vec{r})$.

В частности, в случае экситонов малого радиуса (в рамках представления Ванье), если пренебречь локальными полевыми эффектами, которыми определяется структура $M(r)$, можно произвести замену размытого дипольного момента на строго локализованный, используя приближение

$$M(\vec{r}) \sim M_0 \delta(\vec{r}) \quad [3,5] \quad (21)$$

Полуклассическая модель поляритонных возбуждений становится завершенным, если уравнение (20) дополнить уравнением Максвелла для поперечного электрического поля, в котором экситонная поляризация P (9) играет роль источника поля $\vec{E}$:

$$\nabla_R^2 \vec{E} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \vec{E} = -\frac{4\pi}{c^2} \omega^2 \vec{P} \quad (22)$$

Операторное представление вектора поляризации (9), в приближении хаотических фаз [10], имеет вид [4]

$$P = 2Re \sum_{\vec{K}} M_{\vec{K}_e \vec{K}_h} \alpha_{\vec{K}_e}^+ \beta_{\vec{K}_h}^+ |0\rangle_{\text{yc}} \rightarrow 2 \sum_{\vec{K}} M_{\vec{K}_i \vec{K}_j} C(K) \cdot g \cdot e^{i\vec{K}(\vec{r}_e - \vec{r}_h)} \quad (22a)$$

где $M_{\vec{K}_i \vec{K}_j}$ собственные значения оператора поляризации, $e^{i\vec{K}\vec{r}} \cdot C(K) \cdot g$ -собственные функции.

Рассмотрев коммутационные соотношения между фермионными и квазибозонными операторами B^+ , $[\alpha_{\vec{K}_e}^+ \alpha_{\vec{K}_e}, B^+] \approx 0$, (аналогично для дырок) приближенно выполняющиеся для слабо-возбужденных состояний кристалла [10], можно удостовериться, что оператор поляризации P (9) коммутирует с полным гамильтонианом межзонных возбуждений, так что у них общие собственные функции

$$C(\vec{K}) = B(\vec{K})$$

И если пренебречь локальными полевыми эффектами (21), то

$$\epsilon \omega^2 E + c^2 \nabla_R^2 E = -8\pi \omega^2 M_0 \cdot B(r = 0, R) \quad (23)$$

(см.(17)).

3. Квантование экситонных поляритонов в сферических нанокристаллах.

В предельном случае $R_0 \gg a_b$ (слабое квантование) энергия связи ($e - h$) пары превосходит энергию размерного квантования электрона и дырки. При этом естественно считать, что центр масс ($e - h$) пары отстоит на большом расстоянии от поверхности сферического нанокристалла и влияние поверхности на энергию связи системы ($e - h$) достаточно слабо. С целью обоснования такого приближения, решения уравнения (20) представим в виде разложения по полной системе водородных волновых функции относительного движения $f_n(\vec{r})$:

$$B(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_n A_n(\vec{R}) f_{n,e}(\vec{r}) \quad (24)$$

Представление (24) дает возможность учитывать влияние границы нанокристалла, происходящее за счет размерного квантования движения поляритонных возбуждений как целого внутри квантовой точки. Действительно, коэффициенты разложения $A_n(\vec{R})$ отыскиваются в ходе решения дифференциального уравнения с краевыми условиями на границе КТ. В силу симметрии δ

функции в правой части (20) (см. (21), в разложении (24), для большинства прямозонных полупроводников, вклад дают только s -состояния. Ограничиваясь в разложении (24) волновой функцией относительного движения электрона и дырки для основного состояния

$$f_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad (25)$$

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ -боровский радиус атома водорода, и подставляя разложение (24) в уравнение (20), получим

$$\begin{aligned} (E_g - \hbar\omega)A_0(\vec{R})f_0(\vec{r}) - A_0(\vec{R}) \cdot \frac{\hbar^2}{2\mu^*} \nabla_r^2 f_0(\vec{r}) - f_0(\vec{r}) \frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_R^2 A_0(\vec{R}) - \frac{e^2}{\varepsilon r} A_0(\vec{R})f_0(\vec{r}) = \\ = E(\vec{R})M_0\delta(\vec{r}) \end{aligned} \quad (26)$$

Умножим обе части последнего уравнения на $f_0^*(\vec{r})$ и интегрируем по r

$$(E_g - \hbar\omega)A_0(\vec{R}) + A_0(\vec{R}) \int f_0^*(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu^*} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right\} f_0(\vec{r}) d\vec{r} - \frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_R^2 A_0(\vec{R}) = E(\vec{R})M_0 f_0^*(0) \quad (27)$$

$$\text{Т. е. } (E_g - \hbar\omega + \mathcal{E}_0)A_0(\vec{R}) - \frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_R^2 A_0(\vec{R}) = E(\vec{R})M_0 f_0^*(0) \quad (28)$$

где $\mathcal{E}_0 = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$

Решению уравнения (28) при краевом условии, состоящее в равенстве нулю огибающей функции $A_0(\vec{R})$ на границе КТ ($R = R_0$).

В силу симметрии КТ решение уравнения (28) следует искать в сферической системе координат

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \cdot \frac{1}{\sin \theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(-\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \right] A_0(\vec{R}) + \\ + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \mathcal{E}_0) A_0(\vec{R}) = -\frac{2M^*}{\hbar^2} E(\vec{R}) M_0 f_0^*(0) \end{aligned} \quad (29)$$

При движении в сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме КТ бесконечной глубины момент импульса сохраняется. Рассмотрим стационарные состояния с определенными значениями момента L и его проекции m , которыми определяется угловая зависимость волновой функции состояния движения поляритонного возбуждения как целого.

Вводим оператор квадрата момента

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right], \text{ т.е.} \\ \left[\frac{1}{R^2} \left(2R \frac{\partial}{\partial R} + R^2 \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right) - \frac{\hat{L}^2}{R^2} \right] A_0(\vec{R}) + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \mathcal{E}_0) A_0(\vec{R}) = -\frac{2M^*}{\hbar^2} E(\vec{R}) M_0 f_0^*(0) \end{aligned} \quad (30)$$

В решении $A_0(\vec{R})$ производим разделение радиальной и угловой частей,

$$A_0(\vec{R}) = K(R) Y_{Lm}(\theta, \varphi), \quad (31)$$

где $Y_{Lm}(\theta, \varphi)$ -сферические функции. Учитывая, что

$$\hat{L}^2 Y_{Lm}(\theta, \varphi) = L(L+1) \cdot Y_{Lm}(\theta, \varphi),$$

получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right) K(R) Y_{Lm}(\theta, \varphi) - \frac{L(L+1)}{R^2} K(R) Y_{Lm}(\theta, \varphi) + \\ + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \mathcal{E}_0) K(R) Y_{Lm}(\theta, \varphi) = -\frac{2M^*}{\hbar^2} E(\vec{R}) M_0 f_0^*(0) \end{aligned} \quad (32)$$

Обе части последнего уравнения умножим на $Y_{Lm}^*(\theta, \varphi)$ и интегрируем по θ и по φ . Получим следующее одномерное уравнение

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R}\right) K(R) - \frac{L(L+1)}{R^2} K(R) + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) K(R) =$$

$$= -\frac{2M^*}{\hbar^2} E(\vec{R}) M_0 f_0^*(0) \cdot \iint Y_{Lm}^*(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (33)$$

Подставим

$$K(R) = \frac{\chi(R)}{R} \quad (34)$$

В итоге приходим к уравнению

$$\frac{\partial^2 \chi(R)}{\partial R^2} - \frac{L(L+1)}{R^2} \chi(R) + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) \chi(R) =$$

$$= -\frac{2M^*}{\hbar^2} \cdot R \cdot E(R) M_0 f_0^*(0) \cdot \iint Y_{Lm}^*(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (35)$$

Для состояния с $L = 0$

$$\frac{\partial^2 \chi(R)}{\partial R^2} + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) \chi(R) = C \cdot R \cdot E(R), \quad (36)$$

где $C = -\frac{2M^*}{\hbar^2} \cdot M_0 f_0^*(0) \cdot \iint Y_{Lm}^*(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$.

Частное решение неоднородного дифференциального уравнения (36), где электрическое поле световой волны представляется в виде плоской волны $E(R) = E_0 e^{iKR}$, имеет вид

$$\chi(R) = R(AR + B)e^{iKR} \quad (37)$$

При условии, что $\kappa^2 = iK$ является однократным корнем характеристического уравнения $\kappa^2 + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) = 0$, т. е.

$$K^2 = \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) \quad (38)$$

Подставляя решение (37) в уравнение (36), находим

$$2A + 4iKAR - K^2 AR^2 + 2iKB - K^2 BR + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) AR^2 +$$

$$+ \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) BR = CRE_0 \quad (39)$$

$$\text{т. е. } 2(A + iKB) + \left(4iKA - K^2 B + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) B\right) R +$$

$$+ \left(-K^2 A + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) A\right) R^2 = CRE_0 \quad (40)$$

Приравнявая коэффициенты при членах с одинаковыми степенями R , получим систему

$$\begin{cases} A + iKB = 0 \\ 4iKA - K^2 B + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) B = CE_0 \\ K^2 = \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) \end{cases} \quad (40a)$$

(см. 38)

Из второго и третьего уравнений системы имеем

$$4iKA - \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) B + \frac{2M^*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g - \varepsilon_0) B = CE_0$$

$$\text{т. е. } A = \frac{CE_0}{4iK} = -\frac{iCE_0}{4K}, \quad B = -\frac{A}{iK} = \frac{CE_0}{4K^2} \quad (41)$$

При этом

$$AR + B = -\frac{iCE_0}{4K}R + \frac{CE_0}{4K^2} = \frac{CE_0}{4K^2}(1 - iKR), \text{ так что}$$

$$\chi(R) = \frac{CE_0}{4K^2}(1 - iKR) \cdot R \cdot e^{iKR} \quad \text{и} \quad K(R) = \frac{CE_0}{4K^2}(1 - iKR) \cdot e^{iKR} \quad (42)$$

Решение одномерного уравнения (33), удовлетворяющее краевому условию на границе КТ, представим в виде комбинации $K(-R) + K(R) = \frac{CE_0}{4K^2}[(1 + iKR)e^{iKR} + (1 - iKR) \cdot e^{iKR}] =$
 $\frac{CE_0}{4K^2}[e^{iKR} + e^{-iKR} - iKR(e^{iKR} - e^{-iKR})] = \frac{CE_0}{4K^2}[2 \cos KR + 2KR \sin KR] =$
 $2 \frac{CE_0}{4K^2} \sqrt{K^2 R^2 + 1} \sin(KR + \beta),$
 где $\tan \beta = \frac{1}{KR}$, т. е. решение уравнения (33) имеет вид

$$\frac{CE_0}{2K^2} \sqrt{K^2 R^2 + 1} \cdot \sin\left(KR + \arctan \frac{1}{KR}\right) \quad (43)$$

Краевое условие на границе КТ определяет дозволённые значения волнового вектора $K = K_n$;

$$K_n R_0 + \arctan \frac{1}{K_n R_0} = \pi n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

Которые предопределяют спектр поляритонных состояний (38)

$$\hbar \omega_n = E_n = E_g + \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 K_n^2}{2M^*} \quad (44)$$

и волновые функции

$$B(r, R) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \cdot \frac{CE_0}{2K_n^2} \sqrt{K_n^2 R^2 + 1} \cdot \sin\left(K_n R + \arctan \frac{1}{K_n R}\right) \quad (45)$$

Решения (45) позволяют написать выражение для поляризации (22а), а также оценить коэффициент межзонного поглощения в среде решив уравнение Максвелла(22).

Литература

1. Д. К. Логинов, В.П. Кочерешко и др. ФТТ 51,1555 (2009).
2. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. Наука, М. 1979.
3. I Eyri, A. Stahl. Phys. stat. sol (b), 96, k 83 (1979).
4. Stahl. Phys. stat. sol (b), 94, 221 (1979).
5. Stahl. Phys. stat. sol (b), 106, 575 (1981).
6. Д. К. Логинов. ФТТ 52, 68 (2009).
7. Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Мир М.,1979.
8. А.С. Давыдов. Квантовая механика М.,Физматгиз, 1963.
9. Ф. Бассани, Дж. Пастори Парравичини. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах, Наука, М.,1982.
10. Г. Липкин. Квантовая механика. Мир М.,1977.
11. А. Анималу. Квантовая теория кристаллических твердых тел. Мир М.,1981.

Ամփոփում

Աշխատանքում դիտարկված է $R_0 \gg \Omega_n$ թույլ քվանտացման պայմաններում էքսիտոնային պոլյարիտոնների քվանտացման խնդիրը կիսահաղորդչային սֆերիկ քվանտային կետում:

Էքսիտոնային պոլյարիտոնների հավասարման լուծման ներկայացումն ըստ հարաբերական շարժման ջրածնային ալիքային ֆունկցիաների լրիվ համակարգի վերածմամբ, հնարավորություն է տալիս քվանտային կետի եզրերի ազդեցության հաշվառումը:

Ստացված լուծույթները թույլ կտան հետազայում գնահատելու քվանտային կետի եզրերի ազդեցությունն այնպիսի մակրոսկոպական մեծությունների ձևավորման վրա, ինչպիսին են բևեռացումը, կլանման գործակիցը և այլն:

ԱՐՅԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆԻ ԳԻՏԱԿԱՆ ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ АРЦАХСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

1-2 (23-24) 2011

УДК 561.1

Химия

МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕДИ В ПОЧВЕ

С. Г. Мангасарян

Для обеспечения нормальной жизнедеятельности, кроме макроэлементов, растениям необходимы микроэлементы: бор, марганец, медь, цинк, молибден, кобальт и ванадий. Содержание каждого из этих элементов в растениях составляет от тысячных до сотых долей % [1].

Медь активизирует витамины группы В и задерживает процесс физиологического старения, способствуя тем самым усилению жизнедеятельности листа.

Медь входит в состав целого ряда окислительно-восстановительных ферментов и принимает участие в процессах фотосинтеза, углеводного и белкового обмена. Недостаток доступной растениям меди на осушенных торфяно-болотных почвах с нейтральной или щелочной реакцией вызывает “болезнь обработки” или “белую чуму” у зерновых культур. Кончики листьев становятся белыми и злаковые растения хотя и выбрасывают колос, но полноценных зерен не образуют. При недостатке меди резко снижается урожай зерна, а при остром медном голодании наблюдается полное отсутствие плодоношения [1].

У различных плодовых деревьев при недостатке меди побеги дают в начале вегетационного периода большие приросты, крупные, интенсивно окрашенные листья. Затем верхушечная точка побега отмирает, листья становятся хлоротичными. На коре возникают пузырчатые вздутия, наполненные камедью. Во влажную погоду из разрывов вздутий течет камедь. В дальнейшем большие побеги отмирают. Применение солей меди приводит к восстановлению нормального роста побегов [2].

Недостаток меди в кормах приводит к заболеванию животных лизухой. У животных пропадает аппетит, резко снижается содержание гемоглобина в крови, происходит общее истощение организма, возникает рахит. Анализы показали, что заболевание проявляется в том случае, если в кормах содержание меди составляет менее 4 – 5 мг на 1 кг грубого корма.

Медь – один из важнейших микроэлементов, влияющий на усвоение азота растениями. Медные удобрения содействуют синтезу белков, жиров и витаминов растительными организмами. В биологических системах обнаружен ряд медьсодержащих протеинов, связанный с кислородом: гемоцианин, цитохромная оксидаза, тиросиназа. Церулоплазмин (белок сыворотки крови) содержит свыше 95 % всей меди, находящейся в млекопитающих [3].

Доминирующая роль меди в биологических системах определяется ее способностью стабилизировать серные радикалы. Медь не является остротоксичной для человека. Медь является необходимым элементом, участвующим в работе ряда ферментов и гормонов, в процессе кроветворения. Однако при повышенных содержаниях она токсична. Допустимая суточная нагрузка – 500 мкг/кг массы тела [4]. Медь как окислитель в пищевых продуктах разрушает витамины С и А, ухудшает органолептические свойства, способствует образованию весьма токсичных продуктов окисления липидов в жирах и маслах. В некоторых случаях дефицит меди в организме человека имитирует хроническую его интоксикацию. Канцерогенные и мутагенные свойства меди не установлены.

Таким образом, в круговороте меди: вода - почва – растение – животные и человек, содержание подвижных форм меди в почве занимает приоритетное место.

Аналитический контроль за содержанием меди в объектах окружающей среды, в частности, в почве, является столь же актуальной, как и определение ионов других тяжелых элементов.

Почвы считаются бедными медью при содержании ее легкорастворимых форм меньше 1,5 мг на 1 кг почвы (см. таблицу 1).