

Обменное взаимодействие между электроном и дыркой в полупроводниках в методе сильной связи

© С.В. Гупалов,^{*,**} Е.Л. Ивченко*

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

** Department of Physics, Washington State University Pullman, 99164-2814 Washington, USA

E-mail: ivchenko@coherent.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 15 марта 2001 г.)

Обменное электронно-дырочное взаимодействие в полупроводниках проанализировано в рамках эмпирического метода сильной связи. Показано, что внутри- и межатомные вклады в дальнедействующее обменное взаимодействие входят неэквивалентно. В частности, для экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ в сферическом нанокристалле с кубической решеткой дипольно-дипольный вклад, обусловленный исключительно внутриатомными, или внутриузельными, переходами, не приводит к синглет-триплетному расщеплению экситонного уровня. Межатомные переходы, например анион-катионные переходы между ближайшими соседями в двойных полупроводниковых соединениях, определяют так называемый монополь-монопольный вклад в обменное расщепление экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_7$, и этот вклад не исчезает в нанокристалле сферической формы.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 00-02-16997) и Министерством науки (программа "Физика наноструктур"). Работа С.В.Г. частично финансировалась Федеральным управлением военно-морских исследований (the Office of Naval Research) и Национальным научным фондом (the National Science Foundation) по грантам ECS-0072986, DMR9705403 и DMR-0073364.

Обменное взаимодействие между электроном и дыркой, связанными в экситон в полупроводниковом кристалле, широко изучалось в начале 70-х годов в связи с исследованием тонкой структуры уровней экситонов [1–6]. Обычно выделяют два вклада в матричные элементы оператора обменного взаимодействия. Первый вклад, дальнедействующий, мало меняется на расстояниях порядка постоянной кристаллической решетки и зависит от волнового вектора электронно-дырочной пары как целого. Второй вклад связан с короткодействующей частью кулоновского потенциала и не зависит от волновых векторов электрона и дырки. Матричные элементы оператора дальнедействующего обменного взаимодействия на блоховских волновых функциях вычисляются либо в рамках метода эффективной массы [1,2,4,7], либо с помощью разложения по функциям Ванье (см. [5,6] и ссылки там). При этом матричные элементы оператора скорости (импульса) на функциях Блоха в экстремумах зон в первом случае и матричные элементы координаты на функциях Ванье во втором отождествляются с соответствующими междузонными оптическими матричными элементами. Тем не менее два этих метода приводят к различным результатам для матричного элемента дальнедействующего обменного взаимодействия. Обычно это различие объясняется неэквивалентностью разбиения исходного оператора обменного взаимодействия на дальнедействующую и короткодействующую части в первом и во втором методах [6,8]. Однако предпринятое в первой части настоящей работы рассмотрение дальнедействующего обменного взаимодействия в рамках эмпирического метода сильной связи показывает, что это различие возникает по другой причине. Оказывается, что

компоненты матричного элемента оператора скорости, связанные с межатомными и внутриатомными переходами, которые естественным образом разделяются в методе сильной связи, вносят неэквивалентные вклады в матричный элемент дальнедействующего обменного взаимодействия. В то же время как в методе эффективной массы, так и в методе разложения по функциям Ванье приходится иметь дело с функциями, характеризующими зонные состояния, и выделить различные вклады в матричный элемент оператора скорости в рамках этих методов невозможно. Показано, что матричный элемент оператора скорости в методе эффективной массы не учитывает внутриатомные переходы, тогда как в методе разложения по функциям Ванье, напротив, пренебрегают междуатомной компонентой оператора скорости. Матричные элементы дальнедействующего обменного взаимодействия в этих двух методах получаются при соответствующих предельных переходах из выражения для аналогичных матричных элементов, выведенных нами в рамках эмпирического метода сильной связи.

В последнее время обменное взаимодействие между электроном и дыркой в полупроводниках привлекает большое внимание в связи с интенсивными исследованиями квазиуменьренных структур (квантовых точек), в которых из-за эффекта размерного квантования обменные расщепления экситонных уровней могут в десятки раз превышать аналогичные расщепления в объемных полупроводниках. Теория обменного взаимодействия в квантовых точках строилась либо в рамках метода эффективной массы, как в работах авторов [9–12], либо с помощью разложения по функциям Ванье [13,14]. На результаты, полученные в первой из работ [13], опирались

также авторы работ [15–17]. Как и в случае объемных полупроводников, оба подхода приводили к различным результатам. Поэтому вторая часть настоящей работы посвящена применению развитой в первой части теории к экситону, локализованному в квантовой точке. В качестве примера рассматривается экситон $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ в сферическом нанокристалле полупроводника кристаллического класса T_d радиуса R , малого по сравнению с боровским радиусом экситона a_B .

1. Модель сильной связи в объемном полупроводнике

В модели сильной связи блоховское состояние электрона $|nk\rangle$ раскладывается по атомным орбиталам (см. [18–22] и ссылки там)

$$\langle \mathbf{r} | nk \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{ab\alpha} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_b)] C_{b\alpha}(n, \mathbf{k}) \Phi_{b\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_b). \quad (1)$$

Здесь \mathbf{k} — волновой вектор электрона, n — зонный индекс, \mathbf{a} — вектор, задающий положение элементарной ячейки, b — индекс, нумерующий атомы в отдельной элементарной ячейке, $\boldsymbol{\tau}_b$ — положение атома b внутри элементарной ячейки, α — индекс атомной орбитали. С учетом спина и спин-орбитального расщепления α включает индекс орбитального углового момента $l = s, p, d, s^*, \dots$, полный угловой момент j и проекцию j_z полного углового момента на ось z . В sp^3 модели для однородного полупроводникового кристалла с решеткой цинковой обманки введенные обозначения имеют следующий смысл [18]: b — сорт атома, катион ($b = c$) или анион ($b = a$), $\alpha = l, j, j_z$ с $l = s$ или p , $j = 1/2$ при $l = s$ и $j = 1/2, 3/2$ при $l = p$, $j_z = \pm 1/2$ при $j = 1/2$ и $j_z = \pm 1/2, \pm 3/2$ при $j = 3/2$. Иногда для обозначения атомной орбитали вместо пары \mathbf{a}, b будем использовать один вектор $\mathbf{R} = \mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_b$. Для удобства в (1) выделен множитель $1/\sqrt{N}$, где N — число элементарных ячеек в ящике квантования Борна–Кармана, тогда коэффициенты разложения $C_{b\alpha}(n, \mathbf{k})$ удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_{b\alpha} |C_{b\alpha}(n\mathbf{k})|^2 = 1. \quad (2)$$

Введем параметры сильной связи $H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})$. В \mathbf{k} -представлении уравнение Шредингера принимает вид

$$\sum_{b\alpha} H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{k}) C_{b\alpha}(n, \mathbf{k}) = E_{n\mathbf{k}} C_{b'\alpha'}(n, \mathbf{k}) \quad (3)$$

с электронным гамильтонианом

$$H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{a}} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_b - \boldsymbol{\tau}'_b)] H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\boldsymbol{\tau}'_b - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_b). \quad (4)$$

Для примера укажем, что в sp^3 модели при учете взаимодействия только ближайших соседей имеется десять линейно независимых параметров: диагональные энергии

$E_{sa}, E_{sc}, E_{pa}, E_{pc}$ для s - и p -орбиталей на анионе (a) и катионе (c) без учета спин-орбитального взаимодействия, спин-орбитальные расщепления Δ_a, Δ_c p -орбиталей и четыре матричных элемента взаимодействия $V_{ss}, V_{pp}, V_{pc,sa} \equiv V_{sa,pc}, V_{pa,sc} \equiv V_{sc,pa}$ для ближайших катиона и аниона (межатомным спин-орбитальным взаимодействием для простоты пренебрегается).

В методе сильной связи матричные элементы координаты

$$\langle \mathbf{a}'b'\alpha' | \mathbf{r} | \mathbf{a}b\alpha \rangle = \langle \mathbf{R}'\alpha' | \mathbf{r} | \mathbf{R}\alpha \rangle$$

в базисе атомных орбиталей определяются выражением

$$\langle \mathbf{R}'\alpha' | \mathbf{r} | \mathbf{R}\alpha \rangle = (\mathbf{R}\delta_{\alpha'\alpha} + \mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b) \delta_{\mathbf{R}'\mathbf{R}}, \quad (5)$$

которое диагонально по \mathbf{R} и включает два слагаемых: одно диагонально по орбитали α , пропорционально вектору \mathbf{R} и не зависит от α , а второе не зависит от положения элементарной ячейки и описывает внутриатомные (внутриузельные) переходы

$$\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b = \langle \mathbf{R}\alpha' | \mathbf{r} - \mathbf{R} | \mathbf{R}\alpha \rangle \equiv \langle \mathbf{a}b\alpha' | \mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_b | \mathbf{a}b\alpha \rangle. \quad (6)$$

Учитывая связь

$$\mathbf{v} = \frac{i}{\hbar} (H\mathbf{r} - \mathbf{r}H)$$

между операторами скорости \mathbf{v} и координаты \mathbf{r} , матричные элементы оператора скорости в методе сильной связи можно представить в виде двух слагаемых $\mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(1)}(\mathbf{R}', \mathbf{R})$ и $\mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(2)}(\mathbf{R}', \mathbf{R})$. Первое слагаемое

$$\mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(1)}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = \frac{i}{\hbar} (\mathbf{R} - \mathbf{R}') H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) \quad (7)$$

однозначно определяется параметрами сильной связи и описывает перенос электрона с атома (\mathbf{a}, b) на атом (\mathbf{a}', b'). Вектор $\mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(1)}$ ориентирован вдоль прямой, соединяющей эти атомы, и пропорционален соответствующему матричному элементу сильной связи. Второе слагаемое

$$\mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(2)}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = \frac{i}{\hbar} \begin{cases} (E_{b\alpha'} - E_{b\alpha}) \mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b & \text{при } \mathbf{R}' = \mathbf{R}, \\ \sum_{\alpha''} [H_{\alpha'\alpha''}^{b'b}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) \mathbf{r}_{\alpha''\alpha}^b - \mathbf{r}_{\alpha'\alpha''}^b H_{\alpha''\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})] & \text{при } \mathbf{R}' \neq \mathbf{R} \end{cases} \quad (8)$$

пропорционально внутриатомным матричным элементам координаты, оно отлично от нуля как для внутриатомных, так и для межатомных переходов. В (8) учтено, что при $\mathbf{R}' = \mathbf{R}$ матричный элемент $H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})$ диагонален по α и равен энергии электрона $E_{b\alpha}$ на α орбитали атома b . В \mathbf{k} -представлении для матричных элементов оператора скорости имеем

$$\mathbf{v}_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{a}} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_b - \boldsymbol{\tau}'_b)] \langle 0b'\alpha' | \mathbf{v} | \mathbf{a}b\alpha \rangle. \quad (9)$$

В частности, вклад (7) в этом представлении при $\mathbf{k} = 0$ имеет вид

$$\mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(1)}(\mathbf{k} = 0) = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{a}} (\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_b - \boldsymbol{\tau}_{b'}) H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\boldsymbol{\tau}'_b - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_b). \quad (10)$$

Представим набор коэффициентов $C_{b\alpha}(n, \mathbf{k})$ в виде многокомпонентного столбца $\hat{C}(n, \mathbf{k})$. Столбец $\hat{C}(n, 0)$ является собственным вектором матрицы $H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(0)$ с собственным числом $E_n^0 \equiv E_{n,0}$, соответствующим экстремуму зоны n . Из выражений (4) и (10) следует, что в первом порядке теории возмущений по параметру ka_0 (a_0 — постоянная решетки) гамильтониан сильной связи принимает вид

$$H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(\mathbf{k}) = H_{\alpha'\alpha}^{b'b}(0) + \hbar \mathbf{k} \mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(1)}(\mathbf{k} = 0), \quad (11)$$

а для коэффициентов $C_{b\alpha}(n, \mathbf{k})$ в невырожденной зоне n имеем

$$C_{b\alpha}(n, \mathbf{k}) = C_{b\alpha}(n, 0) + \sum_l' \frac{\hbar \mathbf{k} \mathbf{v}_{ln}^{(1)}}{E_n^0 - E_l^0} C_{b\alpha}(l, 0), \quad (12)$$

где

$$\mathbf{v}_{ln}^{(1)} = \sum_{bb'\alpha\alpha'} C_{b'\alpha'}^*(l, 0) \mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(1)}(0) C_{b\alpha}(n, 0),$$

а штрих означает суммирование по состояниям с $E_l^0 \neq E_n^0$. Заметим, что в отличие от (12) в разложении периодической блоховской амплитуды $u_{n,\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} |n\mathbf{k}\rangle$ по степеням \mathbf{k} входит полный матричный элемент оператора скорости

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,0}(\mathbf{r}) + \sum_l' \frac{\hbar \mathbf{k} \mathbf{v}_{ln}}{E_n^0 - E_l^0} u_{l,0}(\mathbf{r}) + \dots, \quad (13)$$

где

$$\mathbf{v}_{ln} = \mathbf{v}_{ln}^{(1)} + \mathbf{v}_{ln}^{(2)},$$

$$\mathbf{v}_{ln}^{(i)} = \sum_{bb'\alpha\alpha'} C_{b'\alpha'}^*(l, 0) \mathbf{v}_{b'\alpha',b\alpha}^{(i)}(k=0) C_{b\alpha}(n, 0). \quad (14)$$

Для полноты приведем также связь между функциями Ванье $w_n(\mathbf{r})$ и атомными орбиталями (см. [5])

$$w_n(\mathbf{r} - \mathbf{a}') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}ab\alpha} C_{b\alpha}(n, \mathbf{k}) \times \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{a} - \mathbf{a}' + \boldsymbol{\tau}_b)] \Phi_{b\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_b), \quad (15)$$

где суммирование ведется по всем волновым векторам зоны Бриллюэна. Очевидно, использование функций Ванье, характеризующих зонные состояния n , затрудняет разделение вкладов от межатомных и внутриаомных переходов в матричный элемент скорости.

При проведении расчетов в рамках метода сильной связи неизбежно возникает вопрос об относительных вкладах внутриаомных и межатомных переходов в междузонные матричные элементы оператора скорости или импульса электрона и, что эквивалентно, в вероятность

оптического поглощения или излучения в полупроводниках. В ряде работ [23–25] учитывались как те, так и другие переходы, но использованные значения внутриаомных матричных элементов оператора импульса превышали аналогичные значения для анион-катионных переходов. В [26,27] вклад межатомных переходов вообще не учитывался. В то же время многие авторы [28–32] полностью пренебрегали внутриаомными переходами. Как будет показано, в отличие от матричных элементов для оптических переходов, где внутри- и межатомные вклады присутствуют неразделимо, в матричные элементы дальнедействующего обменного взаимодействия между электроном и дыркой в полупроводнике эти вклады входят неэквивалентно.

2. Оператор электрон-дырочного обменного взаимодействия

Оператор обменного кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в полупроводниковом кристалле можно задать матричными элементами [1,2]

$$\begin{aligned} & \langle m', \mathbf{k}'_e; n', \mathbf{k}'_h | U_{exch}^{eh} | m, \mathbf{k}_e; n\mathbf{k}_h \rangle \\ &= - \langle m', \mathbf{k}'_e; \bar{n}, -\mathbf{k}_h | U_{exch}^{ee} | m, \mathbf{k}_e; \bar{n}', -\mathbf{k}'_h \rangle \\ &= \int \psi_{m', \mathbf{k}'_e}^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi_{\bar{n}', -\mathbf{k}'_h}(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{\varkappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ & \quad \times \psi_{\bar{n}, -\mathbf{k}_h}^\dagger(\mathbf{r}_2) \psi_{m, \mathbf{k}_e}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь индексы ee и eh относятся к электрон-электронному и электрон-дырочному представлениям [2] операторов соответственно, \varkappa — (высокочастотная) диэлектрическая проницаемость, $|m, \mathbf{k}_e; n, \mathbf{k}_h\rangle$ — двухчастичное возбужденное состояние кристалла, состояния $|n, \mathbf{k}\rangle$ и $|\bar{n}, -\mathbf{k}\rangle$ связаны операцией инверсии времени, $\psi_{m, \mathbf{k}_e}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | m, \mathbf{k}_e \rangle$ и $\psi_{n, \mathbf{k}_h}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k}_h \rangle$ — блоховские волновые функции соответственно в электронном и дырочном представлениях. Из трансляционной инвариантности объемного кристалла следует, что матричные элементы (16) отличны от нуля только для совпадающих суммарных волновых векторов электронно-дырочной пары

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h = \mathbf{k}'_e + \mathbf{k}'_h. \quad (17)$$

В методе сильной связи блоховские функции берутся в виде (1) с коэффициентами $C_{b\alpha}(m, \mathbf{k}_e)$ и $C_{b\alpha}(n, \mathbf{k}_h)$ соответственно для электрона и дырки. Расчет обменного интеграла в этом методе сводится к сумме по шести дискретным переменным

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)} \sum_{\alpha'_1, \alpha_1, \alpha'_2, \alpha_2} U(\mathbf{R}_1, \alpha'_1, \alpha_1; \mathbf{R}_2, \alpha'_2, \alpha_2) C_{b_1 \alpha'_1}^*(m', \mathbf{k}'_e) \\ & \quad \times C_{b_1 \alpha_1}(\bar{n}', -\mathbf{k}'_h) C_{b_2 \alpha'_2}(m, \mathbf{k}_e) C_{b_2 \alpha_2}^*(\bar{n}, -\mathbf{k}_h), \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$U(\mathbf{R}_1, \alpha'_1, \alpha_1; \mathbf{R}_2, \alpha'_2, \alpha_2) = \frac{e^2}{\varkappa} \iint \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Phi_{b_1 \alpha'_1}^\dagger(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) \Phi_{b_1 \alpha_1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) \times \Phi_{b_2 \alpha'_2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2) \Phi_{b_2 \alpha_2}^\dagger(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2). \quad (19)$$

В дальнейшем мы сосредоточимся только на дальнедействующем обменном взаимодействии (иногда называемом также неаналитическим обменным взаимодействием), поэтому будем считать, что k_e, k_h малы по сравнению с обратной постоянной решетки a_0^{-1} и что в сумму (18) не входят слагаемые с $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_2$. Соответствующий оператор обозначим $U_{exch}^{(long)}$. Очевидно, при формулировании метода сильной связи нужно оговорить заранее, что слагаемые с $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_2$ исключены из общих формул (16) и (18), и вместо них добавить к (18) независимый короткодействующий вклад $U_{exch}^{(short)}$, введя в теорию дополнительные параметры, описывающие внутриузельное обменное взаимодействие.

Для нахождения обменного интеграла сильной связи (19) разложим кулоновский потенциал по степеням $\mathbf{r} - \mathbf{R}$ в окрестности точек $\mathbf{R}_1 = \mathbf{a}_1 + \boldsymbol{\tau}_{b_1}$ и $\mathbf{R}_2 = \mathbf{a}_2 + \boldsymbol{\tau}_{b_2}$ ($\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_2$)

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \approx \frac{1}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - [(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) - (\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2)] \times \frac{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^3} + (\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1)_\lambda (\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2)_\eta \times \frac{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^2 \delta_{\lambda\eta} - 3(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)_\lambda (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)_\eta}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^5}. \quad (20)$$

Используя ортонормированность атомных орбиталей на отдельном узле и формулу (6), получим вместо (19)

$$U(\mathbf{R}_1, \alpha'_1, \alpha_1; \mathbf{R}_2, \alpha'_2, \alpha_2) = \frac{e^2}{\varkappa} \left[\frac{1}{R} \delta_{\alpha'_1 \alpha_1} \delta_{\alpha'_2 \alpha_2} - \left(\mathbf{r}_{\alpha'_1 \alpha_1}^{b_1} \delta_{\alpha'_2 \alpha_2} - \delta_{\alpha'_1 \alpha_1} \mathbf{r}_{\alpha'_2 \alpha_2}^{b_2*} \right) \frac{\mathbf{R}}{R^3} + \mathbf{r}_{\alpha'_1 \alpha_1; \lambda}^{b_1} \mathbf{r}_{\alpha'_2 \alpha_2; \eta}^{b_2*} \frac{R^2 \delta_{\lambda\eta} - 3R_\lambda R_\eta}{R^5} \right], \quad (21)$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$, $R = |\mathbf{R}|$. При расчете дальнедействующего обменного взаимодействия суммирование в (18) по $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ можно заменить на интегрирование по схеме

$$\sum_{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2} \Rightarrow \sum_{b_1 b_2} \sum_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2} \Rightarrow \sum_{b_1 b_2} \iint \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\Omega_0^2},$$

где Ω_0 — объем элементарной ячейки. Важно отметить, что здесь вклад в двойной интеграл от областей переменных \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , лежащих внутри одной и той же элементарной ячейки, пренебрежимо мал и в подынтегральном выражении можно заменить разность

$\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + \boldsymbol{\tau}_{b_1} - \boldsymbol{\tau}_{b_2}$ на $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ вне зависимости от того, совпадают b_1 и b_2 или различаются.

Далее используются тождества

$$\frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r_{1,\lambda} \partial r_{2,\eta}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = -\frac{\partial^2}{\partial r_{1,\lambda} \partial r_{1,\eta}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

$$= \frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 \delta_{\lambda\eta} - 3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)_\lambda (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)_\eta}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^5} + \frac{4\pi}{3} \delta_{\lambda\eta} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

$$\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = V \frac{4\pi}{K^2} \quad (22)$$

и соотношения

$$\sum_{b\alpha} = C_{b\alpha}^*(m, \mathbf{k}_e) C_{b\alpha}(\bar{n}, -\mathbf{k}_h) = \frac{\hbar(\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h) \mathbf{v}_{m\bar{n}}^{(1)}}{E_m^0 - E_n^0}, \quad (23)$$

$$\sum_{b\alpha'\alpha} C_{b\alpha'}^*(m, 0) \mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b C_{b\alpha}(\bar{n}, 0) = -\frac{i\hbar \mathbf{v}_{m\bar{n}}^{(2)}}{E_m^0 - E_n^0}, \quad (24)$$

где матричные элементы $\mathbf{v}_{m\bar{n}}^{(j)}$ ($j = 1, 2$) определены согласно (14), а V — объем кристалла. Для вывода (23) нужно учесть разложение (12) и ортонормированность столбцов $\hat{C}(n, 0)$, а к формуле (24) приходим после умножения и деления вектора $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b$ на $E_m^0 - E_n^0$ и учета тождества

$$\sum_{b\alpha'\alpha} C_{b\alpha'}^*(m, 0) (E_m^0 \mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b - \mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b E_n^0) C_{b\alpha}(\bar{n}, 0) = \hat{C}^\dagger(m, 0) (H\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}H) \hat{C}(\bar{n}, 0),$$

где H — гамильтониан сильной связи (4) при $\mathbf{k} = 0$, $\hat{\mathbf{r}}$ — векторная матрица с компонентами $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b \delta_{b'b}$. В итоге для матричного элемента дальнедействующего обменного взаимодействия получим

$$\langle m', \mathbf{k}'_e; n', \mathbf{k}'_h | U_{exch}^{(long)} | m, \mathbf{k}_e; n, \mathbf{k}_h \rangle = \frac{4\pi e^2}{\varkappa V} \frac{\hbar^2}{(E_m^0 - E_n^0)^2} \left\{ \frac{(\mathbf{Kv}_{m'\bar{n}'}^{(1)}) (\mathbf{Kv}_{m\bar{n}}^{(1)})^*}{K^2} + \frac{(\mathbf{Kv}_{m'\bar{n}'}^{(1)}) (\mathbf{Kv}_{m\bar{n}}^{(2)})^* + (\mathbf{Kv}_{m'\bar{n}'}^{(2)}) (\mathbf{Kv}_{m\bar{n}}^{(1)})^*}{K^2} + \left[\frac{(\mathbf{Kv}_{m'\bar{n}'}^{(2)}) (\mathbf{Kv}_{m\bar{n}}^{(2)})^*}{K^2} - \frac{1}{3} \mathbf{v}_{m'\bar{n}'}^{(2)} \mathbf{v}_{m\bar{n}}^{(2)*} \right] \right\}, \quad (25)$$

где первое, второе и третье слагаемые в фигурных скобках соответствуют вкладам первого, второго и третьего слагаемых в квадратных скобках в (21). Выражение (25)

удобно переписать в виде

$$\langle m', \mathbf{k}'_e; n', \mathbf{k}'_h | U_{exch}^{(long)} | m, \mathbf{k}_e; n, \mathbf{k}_h \rangle = \frac{4\pi e^2}{\varkappa V} \frac{\hbar^2}{(E_m^0 - E_n^0)^2} \times \left[\frac{(\mathbf{K} \mathbf{v}_{m' \bar{n}'})(\mathbf{K} \mathbf{v}_{m \bar{n}})^*}{K^2} - \frac{1}{3} \mathbf{v}_{m' \bar{n}'}^{(2)} \mathbf{v}_{m \bar{n}}^{(2)*} \right] \delta_{\mathbf{k}' \mathbf{k}}, \quad (26)$$

где полный матричный элемент оператора скорости \mathbf{v}_{ln} определен согласно (14).

Результат (26) удобен для анализа пределов применимости метода эффективной массы и разложения по функциям Ванье. В методе эффективной массы для матричного элемента дальнедействующего обменного взаимодействия получается выражение [1–4, 10–12], совпадающее с первым слагаемым в квадратных скобках в (26). Это означает, что в методе эффективной массы пренебрегается внутриатомными переходами и полагается $\mathbf{v}_{ln}^{(2)} = 0$, $\mathbf{v}_{ln} = \mathbf{v}_{ln}^{(1)}$. При использовании разложения функций Блоха по функциям Ванье пренебрегают межатомными переходами и фактически полагают $\mathbf{v}_{ln}^{(1)} = 0$, $\mathbf{v}_{ln} = \mathbf{v}_{ln}^{(2)}$. На это указывает еще и то обстоятельство, что при таком подходе в ответ входят междузонные матричные элементы координаты на функциях Ванье, центрированных на одной и той же элементарной ячейке [5, 6]. Чем более локализованный характер имеют функции Ванье, тем больше оснований пренебрегать междузонными матричными элементами координаты на функциях, центрированных в разных ячейках. Поэтому в пределе, когда функции Ванье локализованы внутри одной элементарной ячейки и можно пренебречь междуатомными переходами, это приближение должно работать лучше всего. На различие результатов для матричного элемента дальнедействующего обменного взаимодействия, полученных в методе эффективной массы и с помощью разложения по функциям Ванье, обращали внимание многие авторы [6, 8], относя это к различному разделению обменного взаимодействия на дальнедействующий и короткодействующий вклады и имея в виду δ -функцию, возникающую в результате обратного фурье-преобразования первого слагаемого в квадратных скобках в (26), (см. также (22)). На самом деле оба эти результата содержатся в виде предельных случаев в общей формуле (26). Более того, как показано в Приложении в связи с обсуждением обменного взаимодействия в квантовых точках, указанная δ -функция не имеет отношения к короткодействующему взаимодействию, связанному с масштабами порядка постоянной кристаллической решетки и меньше.

Для иллюстрации формулы (26) рассмотрим пару простых зон-зону проводимости Γ_6 и валентную зону Γ_7 в полупроводниках типа GaAs. С учетом двукратного спинового вырождения зоны проводимости Γ_6 и валентной зоны Γ_7 основной экситонный уровень состоит из четырех подуровней, характеризующихся полным угловым моментом $J = 0$ (синглет, представление Γ_2) и $J = 1$ (триплет, представление Γ_5). Удобно перейти к базису электронно-дырочных возбуждений, в котором три

состояния $|\nu, \mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h\rangle$ ($\nu = x, y, z$) оптически активны в поляризации $\mathbf{e} \parallel \nu$, а оптический переход в четвертое состояние $|\Gamma_2, \mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h\rangle$ запрещен. Дальнедействующее обменное взаимодействие (26) затрагивает только состояния $|\nu, \mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h\rangle$ и имеет в новом базисе вид

$$\langle \nu', \mathbf{k}'_e, \mathbf{k}'_h | U_{exch}^{(long)} | \nu, \mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h \rangle = \frac{4\pi}{\varkappa V} \left(\frac{e\hbar}{E'_g} \right)^2 \times \left[\frac{K_{\nu'} K_{\nu}}{K^2} |v_{cv}|^2 - \frac{1}{3} |v_{cv}^{(2)}|^2 \delta_{\nu', \nu} \right] \delta_{\mathbf{k}' \mathbf{k}}, \quad (27)$$

где v_{cv} — междузонный матричный элемент оператора скорости, $v_{cv}^{(2)}$ — вклад в v_{cv} , определенный согласно (8) и (14), E'_g — энергетическая щель между зонами Γ_6 и Γ_7 . Для $1s$ -экситона получаем

$$\langle 1s, \mathbf{K} | U_{exch}^{(long)} | 1s, \nu, \mathbf{K} \rangle = \hbar\omega_{LT} \frac{K_{\nu'} K_{\nu}}{K^2} - \frac{1}{3} \hbar\omega_{LT}^{(2)} \delta_{\nu', \nu}, \quad (28)$$

где $\hbar\omega_{LT} = (4/\varkappa a_B^3)(e\hbar|v_{cv}|/E'_g)^2$ — расщепление между состояниями продольного и поперечного экситона, a_B — борровский радиус $1s$ экситона в объемном полупроводнике,

$$\hbar\omega_{LT}^{(2)} = \hbar\omega_{LT} \left(\frac{v_{cv}^{(2)}}{v_{cv}} \right)^2. \quad (29)$$

3. Обменное взаимодействие в сферической квантовой точке

Рассмотрим обменное расщепление уровня нульмерного экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ с волновой функцией

$$\Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \phi_{e,m}(\mathbf{r}_e) \phi_{h,n}(\mathbf{r}_h), \quad (30)$$

представляющей собой произведение одночастичных волновых функций электрона и дырки, локализованных на основных уровнях размерного квантования $e1$ и $h1$ в сферической квантовой яме. Индексы m, n в (30) пробегают значения $\pm 1/2$ проекций спина электрона в зоне проводимости и углового момента дырки $j = 1/2$ в валентной зоне Γ_7 , отщепленной спин-орбитальным взаимодействием от зоны Γ_8 . Предполагается, что радиус квантовой точки R велик по сравнению с постоянной решетки a_0 и в то же время достаточно мал, чтобы можно было не учитывать обусловленное кулоновским взаимодействием подмешивание к функции (30) электронно-дырочных состояний из верхних уровней размерного квантования. Для простых зон Γ_6 и Γ_7 огибающие двух волновых функций $\phi_{e,m}(\mathbf{r}_e)$, $\phi_{h,n}(\mathbf{r}_e)$ в методе эффективной массы при бесконечно высоких барьерах совпадают и имеют вид

$$F(\mathbf{r}) = \frac{\sin(\pi r/R)}{r\sqrt{2\pi R}}. \quad (31)$$

В методе эффективной массы авторами было получено следующее выражение для синглет-триплетного расщеп-

ления основного уровня экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ в нанокристаллическом шарике [10,12]:

$$\Delta_{ST}^{OD}(R) = \pi C \left(\Delta_{ST}^{bulk} + \frac{1}{3} \hbar \omega_{LT} \right) \left(\frac{a_B}{R} \right)^3. \quad (32)$$

Здесь

$$C = \int_0^\pi \frac{\sin^4 x}{x^2} dx \approx 0.672, \quad (33)$$

Δ_{ST}^{bulk} , $\hbar \omega_{LT}$ и a_B — соответственно константа короткодействующего обменного взаимодействия, продольно-поперечное расщепление экситона и экситонный борровский радиус в объемном полупроводнике; предполагается, что фоновая диэлектрическая проницаемость нанокристалла \varkappa совпадает с диэлектрической проницаемостью матрицы \varkappa_m (в [10,12] выведена формула, справедливая также при $\varkappa \neq \varkappa_m$).

Учитывая, что функцию $\phi_{e,m}(\mathbf{r})$ (или $\phi_{h,n}(\mathbf{r})$) можно представить в виде суммы

$$\sqrt{V} \sum_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}} |m\mathbf{k}\rangle,$$

где $F_{\mathbf{k}}$ — фурье-образ огибающей (31) и V — объем ящика Борна–Кармана, и воспользовавшись выражением (1) для $|m\mathbf{k}\rangle$, получаем в методе сильной связи

$$\phi_{e,m}(\mathbf{r}) = \sum_{ab\alpha} S_{b\alpha}(m, \mathbf{a}) \Phi_{b\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_b),$$

$$S_{b\alpha}(m, \mathbf{a}) = \sqrt{\Omega_0} \sum_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_b)] C_{b\alpha}(m, \mathbf{k}) F_{\mathbf{k}}. \quad (34)$$

При $R \gg a_0$ можно пренебречь отличием $\exp(i\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}_b)$ от 1 и использовать разложение (12). Тогда выражение для коэффициентов $S_{b\alpha}$, записанных в форме многокомпонентного столбца, приводится к виду

$$\hat{S}(m, \mathbf{a}) = \sqrt{\Omega_0} \times \left[\hat{C}(m, 0) + \sum_l' \frac{\hbar v_{lm}^{(1)}}{E_m^0 - E_l^0} \hat{C}(l, 0) \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} \right) \right] F(\mathbf{a}), \quad (35)$$

где $F(\mathbf{a})$ — огибающая $F(\mathbf{r})$ при дискретных значениях $\mathbf{r} = \mathbf{a}$. Подчеркнем, что с учетом второго слагаемого в квадратной скобке (35) столбцы $\hat{S}(m, \mathbf{a})$ и $\hat{S}(\bar{n}, \mathbf{a})$ неортогональны

$$\hat{S}^\dagger(m, \mathbf{a}) \hat{S}(\bar{n}, \mathbf{a}) = i\Omega_0 \frac{\hbar v_{m\bar{n}}^{(1)}}{E_l^0} \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} F^2(\mathbf{a}), \quad (36)$$

аналогично тому, как неортогональны столбцы $\hat{C}(m, \mathbf{k}_e)$ и $\hat{C}(\bar{n}, -\mathbf{k}_h)$ при $\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h \neq 0$, (см. (23)).

Расчет матричных элементов обменного взаимодействия на функциях (30) проводится так же, как это делалось в предыдущем разделе для блоховских состояний в объемном кристалле. Поэтому для краткости

мы приведем результат в частном случае $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b = 0$, а затем обсудим, к чему приводит учет внутриузельных матричных элементов $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b$. В указанном частном случае получаем для матричных элементов обменного взаимодействия

$$\frac{e^2}{\varkappa} \sum_{\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} S_{b_1\alpha_1}^*(m', \mathbf{a}_1) S_{b_1\alpha_1}(\bar{n}', \mathbf{a}_1) \times \frac{1}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} S_{b_2\alpha_2}(m, \mathbf{a}_2) S_{b_2\alpha_2}^*(\bar{n}, \mathbf{a}_2). \quad (37)$$

Для состояний m в зоне проводимости Γ_6 и состояний n в валентной зоне Γ_7 произведение $S_{b\alpha}^*(m, \mathbf{a}) S_{b\alpha}(\bar{n}, \mathbf{a})$ отлично от нуля лишь с учетом производной в (35). Поэтому это произведение выражается через компоненты вектора $\partial F^2(\mathbf{a}) / \partial \mathbf{a}$, откуда, в частности, следует тождество (36). Как показано в Приложении, суммирование в (37) можно заменить на независимое интегрирование по \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 с делением на Ω_0^2 . Учитывая соотношение (36), получаем вместо (37)

$$\frac{e^2}{\varkappa} \left(\frac{\hbar}{E_g'} \right)^2 v_{m'\bar{n}',\lambda}^{(1)} v_{m\bar{n},\eta}^{(1)*} \times \iint \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \left(\frac{\partial}{\partial r_{1,\lambda}} F^2(\mathbf{r}_1) \right) \left(\frac{\partial}{\partial r_{2,\lambda}} F^2(\mathbf{r}_2) \right). \quad (38)$$

Перекидывая производные на функцию $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$ и учитывая тождество (22), приходим к интегралу

$$\langle e, m'; h, n' | U_{exch}^{(long)} | e, m; h, n \rangle = \frac{4\pi}{3\varkappa} \left(\frac{e\hbar}{E_g'} \right)^2 v_{m'\bar{n}',\lambda}^{(1)} v_{m\bar{n},\eta}^{(1)*} \int d\mathbf{r} F^4(\mathbf{r}). \quad (39)$$

Из двух слагаемых в правой части (22) вклад в (39) вносит только второе, пропорциональное δ -функции. Для огибающей $F(\mathbf{r})$ в виде (31) имеем

$$\int d\mathbf{r} F^4(\mathbf{r}) = \frac{C}{R^3},$$

где коэффициент C определен согласно (33).

Для учета внутриузельных матричных элементов $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b$ можно воспользоваться формулой (20). Для экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ третье слагаемое в (20) после суммирования по $\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_2$ или эквивалентного ему интегрирования вклада не вносит, и вместо (39) получаем

$$\langle \text{exc}, \nu' | U_{exch}^{(long)} | \text{exc}, \nu \rangle = \frac{\pi C}{3} \hbar \left(\omega_{LT} - \omega_{LT}^{(2)} \right) \frac{a_B^3}{R^3} \delta_{\nu', \nu}, \quad (40)$$

где ω_{LT} и $\omega_{LT}^{(2)}$ введены в (28). Дальнедействующий вклад (40) отличается от аналогичного вклада в (32) множителем

$$\gamma = \frac{\omega_{LT} - \omega_{LT}^{(2)}}{\omega_{LT}} = 1 - \left(\frac{v_{cv}^{(2)}}{v_{cv}} \right)^2. \quad (41)$$

В работе [33] проводился численный расчет обменного взаимодействия в сферических нанокристаллах с помощью метода псевдопотенциала. Выражения (37) или (39) соответствуют монополь-монопольному вкладу в обменное взаимодействие в терминологии [33], а линейное и квадратичное по $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b$ слагаемые — монополь-дипольному и диполь-дипольному вкладам. Отметим, в частности, что величина q_n в формуле (6) из [33] с точностью до общего множителя совпадает с величиной (36). Для экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ в сферической квантовой точке диполь-дипольный вклад исчезает, а монополь-дипольный пропорционален $\omega_{LT} - \omega_{LT}^{(1)} - \omega_{LT}^{(2)} \propto |v_{cv}^{(1)} v_{cv}^{(2)}|$. Для экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_8$ диполь-дипольный вклад отличен от нуля даже для нанокристалла сферической формы. Расчет в методе псевдопотенциала показывает, что для типичных полупроводников CdSe, InP и GaAs монополь-монопольный вклад в дальнедействующее обменное взаимодействие превалирует (см. таблицу 1 в [33]). Поэтому результаты расчета тонкой структуры экситонных уровней в нанокристаллах CdSe, выполненного авторами в рамках метода эффективной массы [10,12], остаются в силе. Можно ожидать, что для широкозонных полупроводников относительная роль внутриузельных матричных элементов $\mathbf{r}_{\alpha'\alpha}^b$, введенных в (5) и (6), возрастет, а коэффициент γ будет заметно отличаться от единицы.

Таким образом, мы показали, что для экситона $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ в сферическом полупроводниковом нанокристалле межатомные переходы, определяемые матричными элементами оператора скорости $\mathbf{v}_{mm}^{(1)}$, приводят к монополь-монопольному вкладу (38). В координатном представлении соответствующий вклад в дальнедействующее обменное взаимодействие вносит вторая производная

$$\frac{\partial^2}{\partial r_{1,\lambda} \partial r_{2,\eta}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

которую можно представить в виде двух слагаемых согласно тождеству (22). Первое слагаемое имеет вид диполь-дипольного взаимодействия и не вносит вклада в синглет-триплетное расщепление (32). Второе слагаемое имеет вид δ -функции, однако эта δ -функция физически не означает, что связанный с нею вклад носит контактный характер и обусловлен областями с \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , лежащими в пределах одной-двух элементарных ячеек, как для короткодействующего обменного взаимодействия. Подчеркнем, что основной вклад в сумму (37) или в интеграл (38) вносят точки \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , удаленные на расстояние, сопоставимое с R .

В опубликованных ранее работах обменное электронно-дырочное взаимодействие рассматривалось при явном или неявном предположении, что вклад в междзональные матричные элементы оператора скорости (или импульса) вносят либо только межатомные [1–4,9–12], либо только внутриатомные [5,6,13–17] переходы. В данной работе впервые построена аналитическая теория дальнедействующего обменного взаимодействия при наличии как тех, так и других, формулы (26), (27) и (40) оригинальны.

В работе [32] отмечалось, что в гетероструктурах типа II межатомные и внутриатомные вклады в матричные элементы оптических переходов входят неравноценно. Поэтому наряду с исследованием обменного взаимодействия в гетероструктурах типа I экспериментальное изучение латеральной оптической анизотропии многослойных наноструктур типа II, таких как ZnSe/BeTe или CdS/ZnSe [32,34,35], может помочь оценить роль внутриатомных переходов.

Приложение

Проанализируем двойную сумму

$$I = \sum_{\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{a}_2} \left(\frac{\partial}{\partial a_{1,\lambda}} H_{\mathbf{a}_1} \right) \frac{1}{|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|} \left(\frac{\partial}{\partial a_{2,\lambda}} H_{\mathbf{a}_2} \right), \quad (\text{П1})$$

где $\mathbf{a}_{1,2}$ — векторы кубической решетки Бравэ, $H_{\mathbf{a}}$ — инвариантная функция, локализованная в сфере радиуса R . Если радиус R существенно превышает постоянную решетки a_0 , то суммирование можно заменить на интегрирование с делением на квадрат объема элементарной ячейки Ω_0^2

$$I = \iint \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\Omega_0^2} \left(\frac{\partial}{\partial r_{1,\lambda}} H_{\mathbf{r}_1} \right) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \left(\frac{\partial}{\partial r_{2,\lambda}} H_{\mathbf{r}_2} \right). \quad (\text{П2})$$

Этот интеграл можно вычислить, проводя интегрирование по частям и используя представление (22) для второй производной от кулоновского потенциала. Из соображений симметрии сразу следует, что первое слагаемое в (22) вклада в (П2) не вносит. Второе слагаемое в (22) приводит к вкладу

$$I = \iiint \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\Omega_0^2} H_{\mathbf{r}_1} \frac{4\pi}{3} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) H_{\mathbf{r}_2} = \frac{4\pi}{3\Omega_0^2} \int d\mathbf{r} H_{\mathbf{r}}^2. \quad (\text{П3})$$

Подчеркнем, что в сумме (П1) перекидывать дифференцирование с функций $H_{\mathbf{a}}$ на $|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|^{-1}$ некорректно, т. е.

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{a}_2} \left(\frac{\partial}{\partial a_{1,\lambda}} H_{\mathbf{a}_1} \right) \frac{1}{|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|} \left(\frac{\partial}{\partial a_{2,\lambda}} H_{\mathbf{a}_2} \right) \\ & \neq \sum_{\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{a}_2} H_{\mathbf{a}_1} H_{\mathbf{a}_2} \frac{\partial^2}{\partial a_{1,\lambda} \partial a_{2,\lambda}} \frac{1}{|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|}. \end{aligned}$$

Левая сумма отлична от нуля, тогда как правая сумма (при инвариантной функции $H_{\mathbf{a}}$) равна нулю.

Полезно провести оценку сделанных приближений. Если оценить H по порядку величины как R^{-3} , то $I \sim (\Omega_0^2 R^3)^{-1}$. Согласно (П2), вклад в интеграл от областей \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , принадлежащих одной элементарной ячейке, имеет малость $(a_0/R)^2 \propto (\Omega_0/R^3)^{2/3}$ по сравнению с самим интегралом I . Очевидно, такую же малость имеет и разность между суммой (П1) по дискретным переменным $\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{a}_2$ и двойным интегралом (П2), в котором переменные интегрирования \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 пробегает

независимо объем внутри сферы радиуса R . Основной вклад в интегрирование вносят точки \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , удаленные на расстояние порядка R . Следовательно, формальное использование δ -функции при переходе от (П2) к (П3) не означает какой-либо особой роли областей с близко расположенными \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 в отличие от короткодействующего обменного взаимодействия, имеющего внутриузельный характер. Поэтому при $R \gg a_0$ ни сумма (П1), ни интеграл (П2) практически не изменятся, если знаменатель $|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|$ под знаком двойной суммы или $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ в подынтегральном выражении заменить соответственно на $|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + \boldsymbol{\tau}_{b_1} - \boldsymbol{\tau}_{b_2}|$ или $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 + \boldsymbol{\tau}_{b_1} - \boldsymbol{\tau}_{b_2}|$ при произвольных $\boldsymbol{\tau}_{b_1}$ и $\boldsymbol{\tau}_{b_2}$. На это обстоятельство уже обращалось внимание в разделе 3 при обсуждении обменного взаимодействия в однородном кристалле.

Список литературы

- [1] Г.Е. Пикус, Г.Л. Бир. ЖЭТФ **60**, 195 (1971); **62**, 324 (1972).
- [2] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).
- [3] В.А. Киселев, А.Г. Жилич. ФТТ **14**, 1438 (1972); **8**, 641 (1974).
- [4] М.М. Denisov, V.P. Makarov, Phys. Stat. Sol. (b) **56**, 9 (1973).
- [5] Ф. Бассани, Дж. Пастори Парравичини. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. Наука, М. (1982), 391 с.
- [6] К. Cho. Phys. Rev. **B10**, 4463 (1976).
- [7] U. Rössler, H.-R. Trebin. Phys. Rev. **B23**, 1961 (1981).
- [8] L.C. Andreani. In: Confined Electrons and Photons / Ed. by E. Burstein, C. Weisbuch. Plenum Press, N. Y. (1995).
- [9] S.V. Goupalov, E.L. Ivchenko, A.V. Kavokin. Superlat. Microstruct. **23**, 1205 (1998).
- [10] S.V. Goupalov, E.L. Ivchenko. J. Cryst. Growth **184/185**, 393 (1998); Acta Physica Polonica **A94**, 341 (1998).
- [11] С.В. Гупалов, Е.Л. Ивченко, А.В. Кавокин. ЖЭТФ **113**, 703 (1998).
- [12] С.В. Гупалов, Е.Л. Ивченко. ФТТ **42**, 1976 (2000).
- [13] T. Takagahara. Phys. Rev. **B47**, 4569 (1993); **B60**, 2638 (1999).
- [14] T. Takagahara. J. Lumin. **87-89**, 308 (2000); Phys. Rev. **B62**, 16840 (2000).
- [15] M. Nirmal, D.J. Norris, M. Kuno, M.G. Bawendi, A.L. Efros, M. Rosen. Phys. Rev. Lett. **75**, 3728 (1995).
- [16] D.J. Norris, A.L. Efros, M. Rosen, M.G. Bawendi. Phys. Rev. **B53**, 16 347 (1996).
- [17] A.L. Efros, M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D.J. Norris, M.G. Bawendi. Phys. Rev. **B54**, 4843 (1996).
- [18] P. Vogl, H.P. Hjalmarson, J.D. Dow. J. Phys. Chem. Solid. **44**, 365 (1983).
- [19] E.L. Ivchenko, A.Yu. Kaminski, U. Rössler. Phys. Rev. **B54**, 5852 (1996).
- [20] T.V. Boykin. Phys. Rev. **B56**, 9613 (1997).
- [21] Е.Л. Ивченко, А.А. Торопов, П. Вуазен. ФТТ **40**, 1925 (1998).
- [22] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, F. Bassani. Phys. Rev. **B57**, 6493 (1998).
- [23] Y.-C. Chang, J.N. Schulman. Phys. Rev. **B31**, 2069 (1985).
- [24] Y.-C. Chang, D.E. Aspnes. Phys. Rev. **B41**, 12 002 (1990).
- [25] G.D. Sanders, Y.-C. Chang. Phys. Rev. **B45**, 9202 (1992).
- [26] Z. Xu. Solid State Commun. **76**, 1143 (1990).
- [27] L.M. Ramaniah, S.V. Nair. Phys. Rev. **B47**, 7132 (1993).
- [28] L.C. Lew Yan Voon, L.R. Ram-Mohan. Phys. Rev. **B47**, 15 500 (1993).
- [29] M. Graf, P. Vogl. Phys. Rev. **B51**, 4940 (1995).
- [30] B. Koopmans, P.V. Santos, M. Cardona. Phys. Stat. Sol. (b) **205**, 419 (1998).
- [31] T. Dumitrică, J.S. Graves, R.E. Allen. Phys. Rev. **B58**, 15 340 (1998).
- [32] A.V. Platonov, V.P. Kochereshko, E.L. Ivchenko, G.V. Mikhailov, D.R. Yakovlev, M. Keim, W. Ossau, A. Waag, G. Landwehr. Phys. Rev. Lett. **83**, 3546 (1999).
- [33] A. Franceschetti, L.W. Wang, H. Fu, A. Zunger. Phys. Rev. **B58**, 13 367 (1998).
- [34] D.R. Yakovlev, E.L. Ivchenko, V.P. Kochereshko, A.V. Platonov, S.V. Zaitsev, A.A. Maksimov, I.I. Tartakovskii, V.D. Kulakovskii, W. Ossau, M. Keim, A. Waag, G. Landwehr. Phys. Rev. **B61**, 2421 (2000).
- [35] M. Schmidt, M. Grün, S. Petillon, E. Kurtz, C. Klingshirn. Appl. Phys. Lett. **77**, 85 (2000).