

УДК 535.34+535.345:539.238

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ, ИНДУЦИРОВАННЫХ ПЛОСКОЙ РЕШЕТКОЙ ДИПОЛЕЙ

Тю Н. С. докт. физ.-мат. наук, проф., Калугина Н. А. ассистент,
Донецкий национальный технический университет

Получено выражение для напряженностей электрических полей, индуцированных плоской решеткой диполей.

The expression for the strength of electric fields, generated by the plane lattice of dipoles, is obtained.

Введение

В последние годы достигнут значительный прогресс в исследовании физических свойств низкоразмерных систем: квантовых ям, сверхрешеток, сверхтонких пленок и т.д. [1]. Если движение квазичастиц, отвечающих за свойства материала, ограничить в одном измерении, то они существенно меняют свой спектр. Следовательно, меняются свойства и самой среды. Таким образом, появляется возможность создавать материалы с уникальными физическими свойствами, которые можно использовать в различных электронных устройствах [1,2]. Сказанное в значительной степени относится к металлам, физические свойства которых определяются электронной подсистемой, или к полупроводникам, в которых реализуются экситоны большого радиуса. Однако, в настоящее время наблюдается все возрастающий интерес и к низкоразмерным системам, образованным из молекулярных соединений, что связано с возможностью их применения в устройствах молекулярной электроники, интегральной оптики и т.д. [2,3]. Подобные системы можно представить себе состоящими из отдельных монослоев, используя последние в качестве структурных единиц при теоретическом исследовании оптических явлений. В этой связи возникает задача вычисления электрического поля, генерируемого плоской решеткой дипольных моментов молекул. Ее решение необходимо для описания эффектов локального поля [4] и для построения экситонных состояний в органических сверхрешетках, при исследовании особенностей оптических явлений в сверхтонких молекулярных пленках [5, 6] и т.д.

В данной работе излагаются результаты расчета электрического поля двумерной плоской решетки диполей, возбужденных внешним переменным электромагнитным полем.

1. Уравнение Пуассона и скалярный потенциал плоской решетки диполей

Рассмотрим плоскую двумерную решетку, образованную из отдельных молекул сорта α , и пусть ось Z направлена перпендикулярно ее плоскости. Если в среде распространяется затравочное электромагнитное поле с напряженностью $\vec{E}_{ext}(\vec{r}, t) = \vec{E}_{ext}^{(0)} \exp i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$, то на этой решетке оно наводит дипольный момент, плотность которого можно записать в виде:

$$\vec{P}_\alpha(\vec{r}_\perp z) = \vec{P}_\alpha e^{ik_3 z_\alpha} \sum e^{i\vec{k}_\perp \vec{R}_n^\perp} \delta(\vec{r}_\perp - \vec{R}_n^\perp) \delta(z - z_\alpha), \quad (1)$$

где $\delta(\dots)$ - дельта-функция Дирака; $\vec{r}_\perp z$ - декартовы координаты точки в пространстве; \vec{R}_n^\perp - двумерный вектор, определяющий положение n -го узла в решетке; z_α - расстояние от начала координат до плоскости вдоль z ; $\vec{k} = (\vec{k}_\perp, k)$ - волновой вектор волны возбуждений.

Для описания электромагнитных полей будем использовать скалярный $\phi(\vec{r}, t)$ и векторный $\vec{A}(\vec{r}, t)$ потенциалы, выбрав для них кулоновскую калибровку $div \vec{A} = 0$. Как известно [6], в этой калибровке продольная часть поля выражается через $\phi(\vec{r}, t)$, а поперечная - через $\vec{A}(\vec{r}, t)$. В данной работе мы будем интересоваться лишь продольными полями, поскольку от них зависит кулоновское взаимодействие зарядов, которое является определяющим при формировании стационарных состояний среды.

Найдем потенциал электрического поля, генерируемый решеткой с плотностью дипольного момента (1). Для этого используем уравнение Пуассона

$$\Delta \phi = 4\pi \rho, \quad (2)$$

в котором плотность заряда определяется формулой $\rho = -div \vec{P}_\alpha$. Наложив циклические граничные условия вдоль \vec{r}_\perp , совершим в (2) двумерное преобразование Фурье

$$\varphi(\vec{r}_\perp z) = \frac{1}{S} \sum_{\vec{q}_\perp} \varphi(\vec{q}_\perp z) e^{i\vec{q}_\perp \vec{r}_\perp} \quad (3)$$

$$\varphi(\vec{q}_\perp z) = \frac{1}{S} \int \varphi(\vec{q}_\perp z) e^{-i\vec{q}_\perp \vec{r}_\perp} d\vec{r}_\perp \quad (4)$$

где S двумерный «объем» цикличности. В результате для фурье – компонент потенциала $\varphi(\vec{q}_\perp, z)$ получается обыкновенное дифференциальное уравнение с сингулярной правой частью

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \vec{q}_\perp^2 \right) \varphi(\vec{q}_\perp z) = 4\pi \left(i\vec{q}_\perp P_\alpha^\perp(\vec{k}, \vec{q}_\perp) \delta(z - z_\alpha) + P_\alpha^{(3)} \frac{d}{dz} \delta(z - z_\alpha) \right) \quad (5)$$

Здесь

$$\bar{P}_\alpha(\vec{k}_\perp, \vec{q}_\perp) = N \bar{P}_\alpha \delta_{\vec{q}_\perp = \vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp} \exp(ik_3 z_\alpha), \quad (6)$$

N – число элементарных точек в «объеме» цикличности S ; $\delta_{\vec{q}_\perp = \vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp}$ – дельта – символ Кронекера, обусловленный трансляционной инвариантностью решетки вдоль осей X и Y ; \vec{b}_\perp – обратный вектор двумерной решетки. Уравнение (5) с источником поля (6) также решается Фурье – преобразованием

$$\varphi(\vec{q}_\perp z) = \frac{1}{S} \sum_{q_3} \varphi(\vec{q}_\perp q_3) e^{iq_3 z} \quad (7)$$

$$\varphi(\vec{q}_\perp q_3) = \int \varphi(\vec{q}_\perp z) e^{-iq_3 z} \quad (8)$$

где L – длина цикличности вдоль z . Выполнив указанное преобразование, из уравнения (5) найдем выражение для фурье – компонент скалярного потенциала

$$\varphi(\vec{q}_\perp q_3) = -\frac{4\pi i e^{-iq_3 z_\alpha}}{q_\perp^2 + q_3^2} \left(\vec{q}_\perp \bar{P}_\alpha^\perp(\vec{k}, q_3) + q_3 P_\alpha^{(3)}(\vec{k}, \vec{q}_\perp) \right) \quad (9)$$

Подставим теперь (9) в (7) и суммирование по q_3 заменим интегрированием согласно соотношения $2\pi \sum_{q_3} \rightarrow \int dq_3$. Вычисляя несобственные интегралы с помощью теории вычетов, приходим к следующей формуле для $\varphi(\vec{q}_\perp z)$:

$$\varphi(\vec{q}_\perp z) = -2\pi \frac{e^{-q_\perp |z-z_\alpha|}}{q_\perp} \left(i\vec{q}_\perp \vec{P}_\alpha^\perp(\vec{k}, \vec{q}_\perp) - \vec{q}_\perp P_\alpha^{(3)}(\vec{k}, \vec{q}_\perp) \operatorname{sgn}(z-z_\alpha) \right), \quad (10)$$

где $\operatorname{sgn}(z-z_\alpha)$ - функция знака.

И, наконец, подставив (10) в (3) и учитывая (6), найдем выражение для скалярного потенциала в некоторой точке пространства $\varphi(\vec{r}z)$. Из-за дельта-символа Кронекера $\delta_{\vec{q}_\perp} = \vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp$ в полученном выражении суммирование по всем возможным значениям \vec{q}_\perp сведется к суммированию по векторам обратной решетки \vec{b}_\perp :

$$\varphi(\vec{r}_\perp z) = -\frac{2\pi}{S_0 q_\perp} \sum_{\vec{b}_\perp} e^{i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp) \vec{r}_\perp} \frac{\exp(i k_3 z_\alpha - |\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| |z-z_\alpha|)}{|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp|} \times \left(i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp) \vec{P}_\alpha^\perp - |\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| P_\alpha^{(3)} \operatorname{sgn}(z-z_\alpha) \right), \quad (11)$$

где $S_0 = S/N$ - «объем» двумерной элементарной ячейки.

2. Длинноволновые и коротковолновые электрические поля, индуцированные решеткой диполей

Перейдем теперь к вычислению напряженностей индуцированных полей. Т.к. $E_\alpha(\vec{r}_\perp z) = -\operatorname{grad} \varphi(\vec{r}_\perp z)$, то

$$E_\alpha^\perp(\vec{r}_\perp z) = \frac{2\pi}{S_0} e^{i k_3 z_\alpha} \sum_{\vec{b}_\perp} \frac{\exp(i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp) \vec{r}_\perp - |\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| |z-z_\alpha|)}{|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp|} \times \left(i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp) \vec{P}_\alpha^\perp - |\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| P_\alpha^{(3)} \operatorname{sgn}(z-z_\alpha) \right) i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp). \quad (12)$$

$$E_\alpha^{(3)}(\vec{r}_\perp z) = \frac{2\pi}{S_0} e^{i k_3 z_\alpha} \sum_{\vec{b}_\perp} \frac{\exp(i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp) \vec{r}_\perp - |\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| |z-z_\alpha|)}{|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp|} \times \left(i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp) \vec{P}_\alpha^\perp - |\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| P_\alpha^{(3)} \operatorname{sgn}(z-z_\alpha) \right) \times \quad (13)$$

$$\times (-|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| \operatorname{sgn}(z-z_\alpha)) - \frac{4\pi}{S_0} e^{i k_3 z_\alpha} \sum_{\vec{b}_\perp} e^{i(\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp) \vec{r}_\perp} \vec{P}_\alpha^\perp \delta(z-z_\alpha).$$

Отметим, что задача об электрическом поле плоской решетки диполей рассматривались в [7] для случая нормального падения воз-

буждающей электромагнитной волны, когда $\vec{k}_\perp = 0$. Полученные выше формулы являются более общими, поскольку они пригодны и при $\vec{k}_\perp \neq 0$, а при $\vec{k}_\perp = 0$ переходят в результаты работы [7]. Рассмотрим их подробнее.

Заметим, прежде всего, что компонента вектора напряженности $E_\alpha^{(3)}(\vec{r}_\perp, z)$, перпендикулярная плоскости решетки, содержит сингулярный член, пропорциональный $\delta(z - z_\alpha)$, который, очевидно, связан с самодействием. Далее будем считать $z \neq z_\alpha$, т.е. рассматривать индуцированное поле вне плоской решетки. При этом из-за трансляционной инвариантности вдоль монослоя, искомое поле будем вычислять на оси Z , полагая $\vec{r}_\perp = 0$. В этом случае формулы (12) и (13) можно записать в единой форме

$$E_\alpha^i(z) = E_\alpha^i(\vec{k}) \exp(ik_3 z), \quad (14)$$

где

$$E_\alpha^i(\vec{k}) = -\frac{2\pi}{S_0} e^{-ik_3(z-z_\alpha)} \sum_{\vec{b}_\perp} \frac{\exp(-|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| |z - z_\alpha|)}{|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp|} \times \\ \times (\theta_{b_\perp}^i \eta_{zz_\alpha}^i) (\theta_{b_\perp}^l \eta_{zz_\alpha}^l P_\alpha^l)$$

- амплитуда поля;

$$\theta_{b_\perp} = ((\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp)_x, (\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp)_y, i|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp|)$$

- комплексный волновой вектор; $i, l = X, Y, Z$; по индексу l в (15) подразумевается суммирование, а по i - нет!

$$\eta_{zz_\alpha}^l = \begin{cases} 1 & , \text{ если } (z - z_\alpha) > 0 \\ 1 - 2\delta_{iz} & , \text{ если } (z - z_\alpha) < 0 \end{cases} \quad (15)$$

В правой части (15) содержатся множители $\exp(-|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| |z - z_\alpha|)$, которые при $\vec{b}_\perp \neq 0$ с ростом $|z - z_\alpha|$ быстро убывают. Поэтому, выделив в ней члены с $\vec{b}_\perp = 0$, выражение для амплитуды индуцированного поля $E_\alpha^i(\vec{k})$ представим в виде суммы двух слагаемых:

$$E_\alpha^i(\vec{k}) = E_\alpha^{(l)i}(\vec{k}) + E_\alpha^{(s)i}(\vec{k}) \quad (16)$$

Первое из них

$$E_{\alpha}^{(l)i}(\vec{k}) = -\frac{2\pi}{s_0 k_{\perp}} \exp(-ik_3(z-z_{\alpha}) + \vec{k}_{\perp}(z-z_{\alpha})) \times$$

$$\times (\theta_0^i \eta_{zz_{\alpha}}^i) (\theta_0^l \eta_{zz_{\alpha}}^l P_{\alpha}^l) \quad (17)$$

пропорционально $\exp(-i\vec{k}_{\perp}|z-z_{\alpha}|)$, поэтому оно убывает на расстояниях порядка $1/k_{\perp}$ и, следовательно, дает вклад в длинноволновую часть индуцированного поля. Что касается второго слагаемого в (16), то оно уменьшается в e раз на межмолекулярных расстояниях и поэтому описывает короткодействующую часть поля. Его удобно записать в виде

$$E_{\alpha}^{(s)i}(\vec{k}) = \sum_l Q_{zz_{\alpha}}^{il}(\vec{k}) P_{\alpha}^l \quad (18)$$

где

$$Q_{zz_{\alpha}}^{il}(\vec{k}) = -\frac{2\pi}{s_0} e^{-ik(z-z_{\alpha})} \sum_{\vec{b}_{\perp} \neq 0} \frac{\exp(-|\vec{k}_{\perp} + \vec{b}_{\perp}| |z-z_{\alpha}|)}{|\vec{k}_{\perp} + \vec{b}_{\perp}|} \times$$

$$\times (\theta_{\vec{b}_{\perp}}^i \eta_{zz_{\alpha}}^i) (\theta_{\vec{b}_{\perp}}^l \eta_{zz_{\alpha}}^l) \quad (19)$$

Нетрудно проверить, что коэффициенты $Q_{zz_{\alpha}}^{il}(\vec{k})$ удовлетворяют соотношениям

$$Q_{zz_{\alpha}}^{il}(\vec{k}) = Q_{zz_{\alpha}}^{il*}(-\vec{k}), \quad Q_{zz_{\alpha}}^{il}(\vec{k}) = Q_{zz_{\alpha}}^{il*}(\vec{k}) \quad (20)$$

и при фиксированных z, z_{α} образуют трехмерную матрицу, след которой равен нулю. Они являются аналогом коэффициентов внутреннего поля для идеальных трехмерных кристаллов [8].

В заключение данного раздела отметим, что формулы (12), (13) позволяют найти макроскопическое поле внутри пластинки, толщина которой l_{α} намного меньше длины электромагнитной волны. Действительно, при усреднении по физически бесконечно малому объему $\geq a^3$, где a – постоянная решетка, в (12), (13) выпадут слагаемые с $b_{\perp} \neq 0$. Если при этом пренебречь пространственной дисперсией ($kl_{\alpha} \ll 1$), считая поле внутри пластинки однородным, то направленная вдоль поверхности компонента макроскопического поля обратится в нуль. Что касается перпендикулярной составляющей этого поля, то, заменяя в (13) $\delta(z-z_{\alpha})$ на $1/l_{\alpha}$, для нее получаем выражение

$$E_{\alpha}^{(3)}(\vec{r}_{\perp} z) = -\frac{4\pi}{v_0} P_{\alpha}^{(3)} \exp i(\vec{k}_{\perp} \vec{r}_{\perp} + k_3 z_{\alpha}) \quad (21)$$

где $v_{\alpha} = s_0 l_{\alpha}$. При $k_{\perp} = k_3 = 0$, то оно переходит в формулу для напряженности электрического поля внутри однородно поляризованной бесконечной плоскопараллельной пластинки [9].

3. Вариационный метод вычисления электрических полей

Приведем другой вывод формулы (15) для электрического поля решетки диполей, который основан на расчете энергии взаимодействия зарядов пробной молекулы с указанным полем.

Предположим, что нейтральная молекула β , обладающая постоянным дипольным моментом \vec{P}_{β} , расположена на оси Z на расстоянии z_{β} от начала координат. Тогда энергия взаимодействия этой молекулы с дипольными моментами, распределенными на плоской решетке в соответствии с (1), определяются формулой

$$V_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \sum_{il} \Gamma_{\alpha\beta}^{il}(\vec{k}_3 k_3) P_{\alpha}^i P_{\alpha}^l \exp(i k_3 z_{\beta}), \quad (22)$$

в которой

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{il}(\vec{k}) = e^{i k_3 (z_{\alpha} - z_{\beta})} \sum_n (\delta_{il} |\vec{r}_{n\alpha\beta}|^2 - 3 r_{n\alpha\beta}^i r_{n\alpha\beta}^l) e^{i k_{\perp} \vec{R}_n^{\perp} (z_{\alpha} - z_{\beta})} \quad (23)$$

- двумерная решеточная сумма; $\vec{r}_{n\alpha\beta} = (\vec{R}_n, z_{\alpha} - z_{\beta})$. Запишем соотношение (23) в виде

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{il}(\vec{k}) = \sum_n e^{-i k_{\perp} \vec{r}_{n\alpha\beta}} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_l} \frac{1}{r} \right\} \Big|_{\vec{r} = \vec{r}_{n\alpha\beta}} \quad (24)$$

и воспользуемся известным интегральным представлением

$$\frac{1}{r} = \frac{2\pi}{N S_0 q_{\perp} q_{\perp}} \sum e^{i \vec{q}_{\perp} \vec{r}_{\perp} - q_{\perp} |z|}$$

В результате (24) переходит в равенство

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{il}(\vec{k}) = \frac{2\pi}{S_0} \sum_{\vec{q}_{\perp} \neq 0} \frac{(\theta_{\vec{q}_{\perp}}^i \eta_{zz\beta}^i)(\theta_{\vec{q}_{\perp}}^l \eta_{z\alpha z\beta}^l)}{\vec{q}_{\perp}} \exp(-\vec{q}_{\perp} |z_{\alpha} - z_{\beta}|) \times \left(\frac{1}{N} \sum_n e^{i(\vec{q}_{\perp} - \vec{k}_{\perp}) \vec{R}_n^{\perp}} \right) \quad (25)$$

Если учесть, что $\vec{R}_n^\perp = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$, где \vec{a}_1, \vec{a}_2 - базисные векторы решетки, то множитель в фигурных скобках этой формулы представляет собой дельта - символ Кронекера, поэтому для $\Gamma_{\alpha\beta}^{il}$ получаем выражение

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{il}(\vec{k}) = \frac{2\pi}{s_0 \vec{b}_\perp} \sum_{\vec{R}_n^\perp} \frac{\exp(-|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp| |z_\alpha - z_\beta|)}{|\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp|} \times \quad (26)$$

$$\times (\theta_{\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp}^i \eta_{z_\alpha z_\beta}^i) (\theta_{\vec{k}_\perp + \vec{b}_\perp}^l \eta_{z_\alpha z_\beta}^l)$$

Подставим теперь (26) в формулу для потенциальной энергии взаимодействия (22) и электрическое поле, индуцированное решеткой диполей, определим как вариационную производную - $\delta \vec{V}_{\alpha\beta}(\vec{k}) / \delta P_\beta^i$. В результате получим выражение, которое в точности совпадает с формулой (14).

Очевидно, что изложенный в данном разделе метод пригоден для расчета электрических полей вне плоской решетки диполей. В частности, он не позволяет найти сингулярные члены в нормальной компоненте поля, описывающие самодействие.

4. Обсуждение результатов

Многие конденсированные системы, включая идеальные молекулярные кристаллы, бесконечные плоскопараллельные пластинки и недавно синтезированные органические сверхрешетки, представляют собой наборы периодически чередующиеся отдельных плоскостей. Используя полученные в предыдущих разделах результаты, изложим способы теоретического описания оптических свойств этих сред.

Рассмотрение начнем с исследования элементарных возбуждений в бесконечной плоскопараллельной пластинке конечной толщины l [9,10]. Предположим, что пластинка состоит из N_3 моноплоскостей, находящихся на одинаковых расстояниях один от другого. Квадратичный гамильтониан этой системы H^{II} , описывающий не взаимодействующие возбуждения, является суммой гамильтонианов 2D экситонов отдельных плоскостей и оператора их кулоновского взаимодействия V . Аналогично тому, как это сделано в предыдущем разделе, этот оператор может быть преобразован к суммам по вектора обратной двумерной решетки \vec{b}_\perp , что позволяет выделить в нем длинноволновые $V_{(l)}$ и коротковолновые $V_{(s)}$ части. Используя это

обстоятельство, гамильтониан пластинки H^{\parallel} можно представить в виде суммы гамильтониана бесконечного идеального кристалла H_0 , на который наложены циклические граничные условия, и оператора поверхностных возмущений $W_{\text{пов.}}$ [9], который содержит параметр $\vec{k}_{\perp} l$. Для нахождения экситонных состояний гамильтониан системы $H_0 + W_{\text{пов.}}$ приводится к диагональному виду. Получающееся при этом уравнение для определения спектра возбуждений является интегральным по проекции волнового вектора на ось Z . Из его анализа вытекает, что наличие поверхностей пластинки приводит к слабой по параметру $1/N_3$ деформации объемных возбуждений и появлению поверхностных состояний двух типов. Первые из них локализованы вблизи поверхностей пластинки на расстояниях порядка $1/k_{\perp}$ и реализуются при выполнении неравенства $1/l \ll k_{\perp} \ll 1/a$. Что касается поверхностных экситонов второго типа, то они возникают при $k_{\perp} \ll 1$ и характеризуются локализацией на межмолекулярных расстояниях. Отметим, что экситоны первого типа, подобно рэлеевским звуковым волнам, обусловлены лишь наличием границ кристалла. В отличие от них возбуждения второго типа возникают из-за искажений состояний молекул и изменений расстояний между ними вблизи поверхностей среды. Подчеркнем, что единое микроскопическое описание поверхностных состояний в плоскопараллельной пластинке, данное в работах [9,10], оказалось возможным лишь благодаря использованию решетки диполей в качестве структурных единиц.

Другой задачей, в которой непосредственно используются выражения для индуцированных электрических полей плоских решеток, является задача исследования эффектов локального поля в органических сверхрешетках. Эти искусственно созданные объекты представляют собой наборы периодически чередующихся слоев молекулярных пленок, которые можно считать образованными из отдельных плоскостей. Вычисления, основывающиеся на формуле (16), показывают, что действующее на некоторую моноплоскость электрическое поле определяется выражением

$$E_{act}^{(\alpha n)i} = E_{act}^i - 4\pi \delta_{iz} P_{\alpha n}^z / v_{\alpha} + \sum_m Q_{\alpha n \alpha m}^{il} P_{\alpha m}^l + \sum_{\beta m} Q_{\alpha n \beta m}^{il} P_{\beta m}^l \quad (27)$$

в котором \vec{E}_{act} длинноволновая часть действующего поля; v_0 - объем элементарной ячейки в решетке α ; n - номер плоскости в ней; штрих

означает суммирование по $n \neq m$. Под его действием на плоскости na наводится дипольный момент

$$P_{\alpha n}^i = a_{il}^{(an)} E_{act}^{(an)l}, \quad (28)$$

где $a_{il}^{(an)}$ - тензор поляризуемости этой плоскости, который вычисляется на 2D состояниях экситонов. Этот дипольный момент дает вклад в действующее поле других моноплоскостей, которые, в свою очередь, меняют действующее поле в моноплоскости na . Таким образом, возникает самосогласованный процесс распространения электромагнитных волн в сверхрешетке, который описывается уравнениями (27) и (28). Используя их, можно найти выражение для тензора диэлектрической проницаемости и затем проанализировать особенности спектров поглощения [4].

В заключение отметим, что развиваемый нами подход позволяет выйти за рамки приближения невзаимодействующих слоев и учесть, например, образование интерфейсных экситонов, построить теорию фермирезонанса в органических сверхрешетках и т.д. Кроме того, можно надеяться, что полученные выше результаты будут полезны при исследовании нелинейных оптических эффектов в этих соединениях.

Список источников.

1. Physics & Applications of Quantum Wells & Superlattices /Ed. By Mendez E. G. & K. Von Klitzing N.Y. London: Plenum Press, 1987.
2. Nonlinear Photonic /Ed. By Gidds H., Khitrova G. & Peyghambarian N.N.Y.: Springer Verlag, 1990.
3. Agranovich V.M. Superlattices & Quantum Wells in Organic Semiconductors: Excitons and Optical Nonlinearities // Physica Scripta.- 1993.-49.-P.699-724.
4. Tyu N.S. Local Field Effects and Tensors of Dielectric Permeabilities in Organic Superlattices // Sol.St.Com.-1994.-V.90.-P.667-675.
5. Тю Н.С. Макроскопическое поле в сверхтонких молекулярных пленках и его проявление в спектрах поглощения и комбинационного рассеяния // Опт. и спектр.-1995.-№6.-С.966-972.
6. Латинін С.А. Мікроскопічна теорія відбиття та заломлення хвиль на шаруватих кристалах // УРЖ. – 2001. – т. 46. № 21- с.88 – 93.
7. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М.: ИЛ.,1957.- 492 с.
8. Сивухин Д.В. Молекулярная теория отражения и преломления света // ЖЭТФ.-1948.-18.- С.976-991.
9. Борн. М., Хуань Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: ИЛ., 1958.- 620 с.
10. Ландау Д.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.- 620 с.
11. Тю Н.С. К теории экситонов в ограниченных молекулярных кристаллах: гамильтониан задачи // ПОВЕРХНОСТЬ: физ.хим.мех.- 1989.-12.- С.7-14.
12. Тю Н.С. К теории поверхностных экситонов в молекулярных кристаллах: спектр возбуждения // ПОВЕРХНОСТЬ: физ. хим. мех.- 1990.-1.- С.5-12.