

Ф И З И К А

УДК 538.915

ПОСТРОЕНИЕ ПРОБНОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ X^- -ТРИОНА В УДЕРЖИВАЮЩЕМ ПОТЕНЦИАЛЕ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Беженар М. В., Кургачев А. Ю., Лигачев Д. В., Тумаев Е. Н.

CONSTRUCTION OF THE TRIAL WAVE FUNCTION OF THE X^- -TRION IN THE RETARDING POTENTIAL OF A QUANTUM DOT IN A CONSTANT MAGNETIC FIELD

Bezhenar M. V., Kurgatchov A. Y., Ligachov D. V., Tumayev E. N.

Kuban State University, Krasnodar
e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru

Abstract. In this article we consider one of the types of quasiparticles in electron-hole plasma that takes place in semiconductors, bound state of two electrons and hole – it is a negatively charged X^- -trion.

It is hypothesized that two-dimensional triions formed in semiconductor heterolayers are more stable formations than three-dimensional triions, that's why the two-dimensional triions are investigated in the article. For such triions a Hamiltonian is drawn that describes a system of two electrons and hole captured by the oscillator potential of quantum dot. The oscillatory potential that captures quasiparticles is a stabilizing factor that keeps triions from decay, which makes it possible to observe the triions at sufficiently high temperatures.

As additional stabilizing factor we took constant uniform magnetic field directed perpendicular to heterolayer that contains the quantum dot. It is shown that the presence of magnetic field results to change in parameters of the oscillator potential. The interaction of electrons and holes is described with the help of the Coulomb potential. A trial wave function of the X^- -trion is obtained in neglecting of spin-orbit interaction for all quasiparticles and exchange interaction between electrons (the Hartree approximation). Quantum numbers characterizing the orbital motion of individual quasiparticles constituting the trion are introduced.

The energies of individual quasiparticles constituting the trion are calculated. A method for calculating the binding energy of trion is discussed. The proposed method of calculation can be used to calculate the energy characteristics of positively charged X^+ -trion.

The formation of quasiparticles complexes like triions during capture of electrons and holes by quantum dots must also take place for impurity ions, which will affect the spectrum of absorption and luminescence of semiconductors which contain impurity ions. As a result of this, we postulate that in calculation of spectroscopic properties of impurity ions, it is not enough to take into account only the effects of covalent bonding between atoms in semiconductor structures, it is also necessary to take into account the effects of capture of triions and other more complex quasiparticles formations.

Keywords: semiconductor heterostructure, electron, hole, quasiparticle, trion, quantum dot, oscillator potential, trial wave function.

Введение

Трионами называют связанные электрон-дырочные системы, состоящие либо из дырки

и двух электронов (X^- -трион), либо из электрона и двух дырок (X^+ -трион) [1]. Существование в полупроводниковых структурах та-

Беженар Мария Викторовна, магистрант кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: inia@1610.yandex.ru.

Кургачев Алексей Юрьевич, аспирант кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: kurgachevalex@yandex.ru.

Лигачев Дмитрий Владимирович, аспирант кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: ligach23@mail.ru.

Тумаев Евгений Николаевич, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru.

Работа выполнена в рамках гранта № 16-42-230280 «Теоретическое и экспериментальное исследование коллективных явлений в электронно-дырочных системах в полупроводниковых наноструктурах».

ких комплексов было предсказано Лампертом еще в 1958 г. [2]. Их экспериментальное изучение затруднялось тем, что трионы имеют низкую энергию кулоновской связи трех частиц в трех измерениях, что, в свою очередь, приводит к тому, что одним из условий наблюдения трионов является очень низкая температура (~ 1 К). Но в связи с интенсивным развитием гетероструктур, появлением возможности создания искусственных объектов с заданными свойствами, за счет использования квантоворазмерных наноструктур (структур, обладающих пониженной размерностью), появилась возможность наблюдения трионов на практике за счет увеличения характерной энергии связи, что и было проделано Кхенгом в 1992 г. [3].

Теоретически также рассматривались трионы, являющиеся аналогами таких водородоподобных систем, как молекула водорода H_2^+ (X^+ -трион) и ион водорода H^- (X^- -трион) [1, 4]. В этих работах предлагается вариационная функция, описывающая как X^- , так и X^+ -трионы, при любых отношениях эффективных масс электрона и дырки в двумерном случае.

Актуальность данной работы состоит в том, что была высказана гипотеза о том, что в электрон — дырочной плазме образуются электрон дырочные комплексы — трионы, а также была совершена попытка описания этих квазичастиц в удерживающем потенциале квантовой точки при наличии постоянного магнитного поля без использования вариационных методов.

1. Построение пробной волновой функции

Для начала опишем вид гамильтониана системы так, как это определяет вид уравнения Шредингера. Рассматриваемая система: X^- -трион, локализованный в осцилляторной квантовой яме в постоянном магнитном поле. Исходя из этого,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e^*} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e^*} + \frac{\hat{p}_3^2}{2m_h^*} + \\ & + \frac{m_e^*\omega_0^2 r_1^2}{2} + \frac{m_e^*\omega_0^2 r_2^2}{2} + \frac{m_h^*\omega_0^2 r_3^2}{2} + \\ & + \frac{1}{8}m_e^*\omega_c^2 r_1^2 + \frac{1}{8}m_e^*\omega_c^2 r_2^2 + \frac{1}{8}m_h^*\omega_c^2 r_3^2 + \\ & + \frac{1}{2}\hbar\omega_c \hat{L}_z + \frac{1}{2}g^* \frac{m_e^*}{m_e} \hat{S}_z \hbar\omega_c + \frac{1}{2}g^* \frac{m_h^*}{m_e} \hat{S}_z \hbar\omega_c + \end{aligned}$$

$$+ \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|}, \quad (1.1)$$

где $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3$ — операторы импульса первого, второго электрона и дырки соответственно;

m_e^*, m_h^* — эффективные массы электрона и дырки соответственно;

ω_0 — циклическая частота колебаний системы;

ω_c — циклотронная частота;

\hbar — приведенная постоянная Планка;

$\hat{L}_z - z$ — компонента оператора момента импульса, причем $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$;

g^* — эффективный g -фактор;

m_e — масса электрона;

$\hat{S}_z - z$ — компонента оператора спина, записывается следующим способом:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

σ_z — матрица Паули;

e — заряд электрона;

$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ — радиус-векторы первого и второго электронов и дырки, соответственно;

r_1, r_2, r_3 — длины векторов.

Поскольку мы рассматриваем трион в осцилляторном параболическом потенциале, моделирующем квантовую точку, то кулоновское взаимодействие между частицами, составляющими трион, можем рассматривать как возмущение, то есть

$$\begin{aligned} & \frac{m_e^*\omega_0^2 r_1^2}{2} + \frac{m_e^*\omega_0^2 r_2^2}{2} + \frac{m_h^*\omega_0^2 r_3^2}{2} + \\ & + \frac{1}{8}m_e^*\omega_c^2 r_1^2 + \frac{1}{8}m_e^*\omega_c^2 r_2^2 + \frac{1}{8}m_h^*\omega_c^2 r_3^2 > \\ & > \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|}, \quad (1.2) \end{aligned}$$

это существенно упрощает задачу, так как квантовомеханическую задачу трех тел, связанных кулоновским взаимодействием, невозможно решить в общем случае, используя аналитические методы. Исходя из этого условия, получаем следующее выражение

$$V_{\text{вз}} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|}, \quad (1.3)$$

где $V_{\text{вз}}$ — потенциал возмущения, не зависящий явно от времени.

Исходя из уравнений (1.2)–(1.3), можем «разбить» гамильтониан системы на три независимых гамильтониана каждой частицы, составляющей трион, что приводит такому же

«разбиению» энергии системы

$$E = E_1^{(e)} + E_2^{(e)} + E_3^{(h)} + E_{вз}, \quad (1.4)$$

где $E_1^{(e)}, E_2^{(e)}, E_3^{(h)}, E_{вз}$ — энергии первого и второго электронов, дырки, а также энергия их взаимодействия соответственно.

Энергию всех частиц, входящих в систему, считаем малой поправкой к значению энергии системы и в соответствии с теорией возмущения находим

$$E_{вз} = \langle \Psi^{(0)} | V_{вз} | \Psi^{(0)} \rangle. \quad (1.5)$$

Из формулы (1.5) следует, что для расчета энергии взаимодействия квазичастиц, составляющих трион, т.е. энергии связи триона, необходимо знание волновой функции триона в нулевом приближении, которое требует решения уравнения Шредингера. Как сказано выше, уравнение Шредингера для систем, состоящих из более, чем одного электрона, практически не может быть решено аналитически, даже численное его решение — сложная задача. В связи с этим используют приближенные методы вычисления энергии и волновых функций. В данном случае использован так называемый метод самосогласованного поля или метод Хартри. Суть этого метода заключается в предположении, что каждая частица рассматривается как движущаяся в «самосогласованном поле», создаваемом остальными частицами, то есть волновая функция многочастичной системы может быть представлена в виде произведения функций каждой частицы по отдельности, поэтому функцию вида $\Psi = \Psi(r_1 r_2 r_3)$ мы преобразуем к следующему виду:

$$\Psi = \Psi_1^{(e)} \Psi_2^{(e)} \Psi_3^{(h)}, \quad (1.6)$$

где $\Psi, \Psi_1^{(e)}, \Psi_2^{(e)}, \Psi_3^{(h)}$ — волновые функции триона, первого электрона, второго электрона и дырки соответственно.

Стационарное уравнение Шредингера в окончательном виде

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e^*} \Psi + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e^*} \Psi + \frac{\hat{p}_3^2}{2m_h^*} \Psi + \\ & + \frac{m_e^* \omega_0^2 r_1^2}{2} \Psi + \frac{m_e^* \omega_0^2 r_2^2}{2} \Psi + \frac{m_h^* \omega_0^2 r_3^2}{2} \Psi + \\ & + \frac{1}{8} m_e^* \omega_c^2 r_1^2 \Psi + \frac{1}{8} m_e^* \omega_c^2 r_2^2 \Psi + \frac{1}{8} m_h^* \omega_c^2 r_3^2 \Psi - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi - \frac{\hbar^2}{4} g^* \frac{m_e^*}{m_e} \omega_c \Psi - \\ & - \frac{\hbar^2}{4} g^* \frac{m_h^*}{m_e} \omega_c \Psi = E \Psi. \quad (1.7) \end{aligned}$$

2. Решение уравнения Шредингера

Принимая во внимание выражения (1.3), (1.4), (1.6) и (1.7), можем решать уравнение Шредингера для каждой частицы в отдельности. Другими словами, уравнение (1.7) сводится к системе трех независимых уравнений для каждой из трех квазичастиц, составляющих трион. Эти уравнения имеют одинаковую структуру, отличаясь лишь значениями параметров, поэтому для нахождения волновой функции (1.6) достаточно решить приведенное ниже уравнение для первого электрона (индекс, обозначающий номер квазичастицы, опущен)

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{p}^2}{2m_e^*} \Psi + \frac{m_e^* \omega_0^2 r^2}{2} \Psi + \frac{1}{8} m_e^* \omega_c^2 r^2 \Psi - \\ & - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi - \frac{\hbar^2}{4} g^* \frac{m_e^*}{m_e} \omega_c \Psi = E \Psi. \quad (2.1) \end{aligned}$$

$$\Psi(r, \varphi) = \Psi(r) e^{i l \varphi}, \quad (2.2)$$

где l — орбитальное квантовое число, принимающее целочисленные значения. Учитывая явный вид оператора квадрата импульса в двумерном пространстве в полярных координатах

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 &= -\hbar^2 \nabla^2 = \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \quad (2.3) \end{aligned}$$

подставляя (2.2) и (2.3) в выражение (2.1) и производя все необходимые сокращения, получим

$$\begin{aligned} & \Psi'' + \frac{1}{r} \Psi' + \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E - m \omega_c m_e^* + \frac{g^* (m_e^*)^2 \omega_c}{2m_e} - \right. \\ & \left. - \left[\frac{(m_e^*)^2 \omega_0^2}{\hbar^2} + \frac{(m_e^*)^2 \omega_c^2}{4\hbar^2} \right] r^2 - \frac{l^2}{r^2} \right) \Psi = 0. \quad (2.4) \end{aligned}$$

Решая дифференциальное уравнение (2.4) для осциллятора, определяем уровни энергии и волновую функцию нормального состояния [5]

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}, \quad (2.5)$$

$$\Psi = cr^m \exp\left(-\frac{m_e^*}{2\hbar} \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}} r^m\right). \quad (2.6)$$

Выражение (2.6) является волновой функцией для первого электрона, волновые функции для второго электрона и дырки имеют аналогичный вид, поэтому запишем функции для каждой частицы, а также окончательную волновую функцию триона, являющуюся решением уравнения (1.7)

$$\Psi_1^{(e)} = c_1 r_1^m \eta, \quad \Psi_2^{(e)} = c_2 r_2^m \eta, \quad \Psi_3^{(h)} = c_3 r_3^m \eta,$$

$$\eta = \exp\left(-\frac{m_e^*}{2\hbar} \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}} r_1^m\right),$$

$$\Psi = \Psi_1^{(e)} \Psi_2^{(e)} \Psi_3^{(h)} =$$

$$= C (r_1 r_2 r_3)^m \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}} \xi\right),$$

где $\xi = m_e^* r_1^2 + m_e^* r_2^2 + m_h^* r_3^2$ и c_1, c_2, c_3, C — нормировочные множители, явный вид которых в настоящей статье не приводится

Заключение

Результатами данной работы являются выдвинутая гипотеза о том, что образующиеся в электрон-дырочной плазме трехчастичные комплексы являются стабильными при их захвате точечными дефектами. Для такого локализованного X^- -триона была предложена пробная волновая функция в удерживающем потенциале квантовой точки в постоянном магнитном поле в приближении Хартри, не учитывающем обменных эффектов. Данная работа дает возможность на основе предложенной модели вычислить энергию связи частиц, составляющих X^- -трион. Использование предложенной волновой функции трехчастичного комплекса квазичастиц позволяет также рассчитать энергию связи положительно заряженного X^+ -триона.

Литература

1. *Сергеев Р.А., Сурис Р.А.* Энергия основного состояния X^- и X^+ -трионов в двумерной квантовой яме при произвольном соотношении масс // *Физика твердого тела*. 2001. Т. 43. Вып. 4. С. 714–718.
2. *Lampert M.A.* Mobile and immobile effective-mass-particle complexes in nonmetallic solids // *Phys. Rev. Lett.* 1958. Vol. 1. No. 12. P. 450–453.
3. *Kheng K., Cox R.T., d'Aubigne Y.M., Bassani F., Saminadayar K., Tatarenko S.* Observation of negatively charged excitons X^- in semiconductor quantum wells // *Phys. Rev. Lett.* 1993. Vol. 71. No. 11. P. 1752–1756.
4. *Семина М.А., Сергеев Р.А., Сурис Р.А.* Локализация электронно-дырочных комплексов на флуктуациях интерфейсов квантовых ям // *Физика и техника полупроводников*. 2006. Вып. 11. С. 1373–1380.
5. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2016. 800 с.

References

1. *Sergeev, R.A., Suris, R.A.* The energy of the ground state of X^- and X^+ -trions in a two-dimensional quantum well with an arbitrary mass ratio. *Fizika tverdogo tela* [Solid State Physics], 2001, vol. 43, iss. 4, pp. 714–718. (In Russian)
2. *Lampert, M.A.* Mobile and immobile effective-mass-particle complexes in nonmetallic solids. *Phys. Rev. Lett.*, 1958, vol. 1, no. 12, pp. 450–453.
3. *Kheng, K., Cox, R.T., d'Aubigne, Y.M., Bassani, F., Saminadayar, K., Tatarenko, S.* Observation of negatively charged excitons X^- in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, vol. 71, no. 11, pp. 1752–1756.
4. *Semina, M.A., Sergeev, R.A., Suris, R.A.* Localization of electron-hole complexes on fluctuations of quantum well interfaces. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Physics and technology of semiconductors], 2006, iss. 11, pp. 1373–1380. (In Russian)
5. *Landau, L.D., Lifshitz, E.M.* Quantum mechanics. Nonrelativistic theory. Fizmatlit, Moscow, 2016. (In Russian)