

Ф И З И К А

УДК 538.915

doi: 10.31429/vestnik-15-2-70-73

СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННОГО ТРИОНА, ЛОКАЛИЗОВАННОГО В ОКРЕСТНОСТИ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

Кургачёв А. Ю., Лигачёв Д. В., Рудоман Н. Р., Тумаев Е. Н.

THE STRUCTURE OF THE ENERGY LEVELS OF A NEGATIVELY CHARGED TRION LOCALIZED IN THE VICINITY OF A QUANTUM DOT

A. Y. Kurgachev, D. V. Ligachev, N. R. Rudoman, E. N. Tumayev

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

Abstract. In the present paper, the bound states of three quasiparticles are considered – a negatively charged trion consisting of two electrons and a hole. It is noted that delocalized states of trions are possible only at low temperatures because of the small binding energy. It is indicated that among the stabilizing factors are the reduced dimensionality of the system (trions in a semiconductor heterolayer are more stable compared to trions in bulk semiconductors), the presence of an external magnetic field, the capture of the trion by a confining potential of a point defect, including a quantum dot or an impurity ion. The article deals with a negatively charged trion localized in the neighborhood of a point defect in a semiconductor heterolayer, which is regarded as a two-dimensional object. It is shown that when studying the ground and low-lying excited states of a trapped trion, the Coulomb interaction between quasiparticles can be regarded as a perturbation in comparison with the retarding potential, which is described using a two-dimensional oscillator potential. A Hamiltonian is constructed that describes a trion captured by a point defect. The asymptotic expressions for single-particle wave functions of electrons and holes are found. Energy levels of on-particle states are found. In the Hartree-Fock approximation, the wave function of the trion is antisymmetric with respect to permutations of the electrons. It is noted that a negatively charged trion can exist in two different forms, differing in the magnitude of the total spin of the electron subsystem of the trion, an ortho-trion with zero spin and a parityon with a spin of unity. Matrix elements for calculating the binding energy of the trion have been compiled with the aid of which the binding energy for ortho- and para-trions is estimated. The possibilities of experimental detection of ortho- and para-trions are discussed. It is noted that the technique for studying the structure of low-lying energy levels of a negatively charged trion trapped by a point defect can also be used to study a positively charged trion consisting of two holes and an electron.

Keywords: semiconductor heterostructure, electron, hole, quasiparticle, trion, point defect, oscillator potential, trion wave function.

Тонкопленочные гетероструктуры на основе полупроводниковых соединений состава $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ где $A^{\text{III}} = \text{Al, Ga, In}$, $B^{\text{V}} = \text{P, As, Sb}$, а также твердые растворы на их основе широко используются при создании солнечных элементов нового поколения. Характерной особенностью гетероструктур является квази-

двумерный характер движения квазичастиц (электронов и дырок) в электронно-дырочной плазме гетерослоя. Такой характер движения является стабилизирующим фактором при образовании связанных состояний квазичастиц различного вида. К их числу относятся экситоны [1], положительно и отрицательно

Кургачёв Алексей Юрьевич, аспирант кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: l-e-x-o@yandex.ru.

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

Рудоман Нэлли Радиковна, аспирант кафедры физики и информационных систем Кубанского государственного университета; e-mail: rudnel@ftf.kubsu.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».

заряженные трионы [2–5], биэкситоны (связанные состояния двух экситонов), битрионы (связанные состояния двух трионов) и другие составные квазичастицы, вплоть до образования электронно-дырочной жидкости [6]. Другими факторами, стимулирующими образование составных квазичастиц, являются наличие внешнего магнитного поля и локальные нарушения симметрии кристаллической решетки, к числу которых относятся точечные дефекты решетки (вакансии, межузельные атомы и т.п.), примесные атомы и ионы, квантовые точки. В том случае, когда локальный дефект обладает энергией меньшей, чем его окружение, он является ловушкой для квазичастиц электронно-дырочной плазмы. Когда рассматривается структура низколежащих уровней энергии (основное и низковозбужденные состояния), захватывающий потенциал можно аппроксимировать двумерным параболоидом.

В настоящей статье теоретически рассматривается отрицательно заряженный X^- -трион, состоящий из двух электронов и дырки [2, 5]. Такая система описывается гамильтонианом следующего вида

$$H = \frac{p_1^2}{2m_e^*} + \frac{p_2^2}{2m_e^*} + \frac{p_3^2}{22m_h^*} + \frac{m_e^*\omega^2 r_1^2}{2} + \frac{m_e^*\omega^2 r_2^2}{2} + \frac{m_h^*\omega^2 r_3^2}{2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} - \frac{e^2}{|r_1 - r_3|} - \frac{e^2}{|r_2 - r_3|}, \quad (1)$$

где p_1, p_2, p_3 — импульсы первого, второго электрона и дырки соответственно; m_e^* , m_h^* — эффективные массы электронов и дырки, ω — циклическая частота финитного движения квазичастиц в осцилляторе потенциала точечного дефекта, которая предполагается одинаковой для электронов и дырки, r_1, r_2, r_3 — радиус-векторы первого, второго электронов и дырки соответственно, e — фундаментальный заряд.

При рассмотрении структуры низколежащих уровней триона, локализованного в окрестности точечного дефекта, кулоновское взаимодействие между частицами, составляющими трион, можем рассматривать как малое возмущение

$$\begin{aligned} & \frac{m_e^*\omega^2 r_1^2}{2} + \frac{m_e^*\omega^2 r_2^2}{2} + \frac{m_h^*\omega^2 r_3^2}{2} > \\ & > \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} - \frac{e^2}{|r_1 - r_3|} - \frac{e^2}{|r_2 - r_3|}. \quad (2) \end{aligned}$$

Обозначим это малое возмущение как $V = V(r_1, r_2, r_3)$

$$V = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} - \frac{e^2}{|r_1 - r_3|} - \frac{e^2}{|r_2 - r_3|}, \quad (3)$$

представим исходный гамильтониан (1) в виде невозмущенного гамильтониана H_0 и возмущения V

$$H = H_0 + V.$$

Так как гамильтониан H_0 представляется суммой трех слагаемых, каждое из которых зависит только от одной из координат r_1, r_2, r_3 , то в нулевом приближении трион рассматривается как система из трех квазичастиц, каждая из которых движется независимо от остальных. Следовательно, энергия X^- -триона разбивается на сумму энергий квазичастиц и энергии их взаимодействия ΔE

$$E = E_1^{(e)} + E_2^{(e)} + E_3^{(h)} + \Delta E, \quad (4)$$

где $E_1^{(e)}, E_2^{(e)}, E_3^{(h)}$ — энергии первого и второго электронов и дырки соответственно. Для расчета энергии взаимодействия ΔE используем формулу [7]

$$\Delta E = \langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle, \quad (5)$$

где Ψ_0 — волновая функция квазичастиц в нулевом приближении, удовлетворяющая уравнению

$$H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0, \quad (6)$$

где $E_0 = E_1^{(e)} + E_2^{(e)} + E_3^{(h)}$.

Как отмечено выше, гамильтониан H_0

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m_e^*} + \frac{p_2^2}{2m_e^*} + \frac{p_3^2}{2m_h^*} + \frac{m_e^*\omega^2 r_1^2}{2} + \frac{m_e^*\omega^2 r_2^2}{2} + \frac{m_h^*\omega^2 r_3^2}{2}$$

распадается на три слагаемых, каждое из которых зависит только от одной координаты, вследствие чего уравнение Шредингера (6) заменяется системой трех уравнений для отдельных квазичастиц

$$-\frac{\lambda^2}{2m_k^*} \nabla_k^2 \psi_{0k} + \frac{m_k^*\omega^2 r_k^2}{2} \psi_{0k} = E_{0k} \psi_{0k}, \quad (7)$$

где $k = 1, 2, 3$, \hbar — постоянная Планка,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

— двумерный оператор Лапласа в полярных координатах (r, φ) , $\psi_{0k}(r_k, \varphi_k)$ — волновая функция k -й квазичастицы в нулевом приближении. Через E_{0k} обозначены введенные выше энергии одночастичных состояний $E_1^{(e)}$, $E_2^{(e)}$, $E_3^{(h)}$ соответственно.

Уравнения, входящие в систему (7), имеют одинаковую структуру, отличаясь лишь значениями эффективных масс и нумерацией координат. Решение этих уравнений может быть представлено в виде

$$\psi_0(r, \varphi) = \Phi_0(r) \exp(il\varphi), \quad (8)$$

где l — целое число, $\hbar l$ — величина углового момента L_z одночастичного состояния. Состояние триона с минимальной энергией реализуется при отсутствии орбитального движения, выражение (8) для волновой функции упрощается

$$\psi_0(r, \varphi) = \Phi_0(r).$$

Вводя величину r_{0k} при помощи равенства

$$r_{0k} = \sqrt{\frac{m_k^* \omega}{\hbar}},$$

которая имеет смысл среднего радиуса орбиты квазичастицы при ее движении вокруг центра масс (эти радиусы позволяют оценить размер триона), и безразмерные координаты $\xi_k = r_k/r_{0k}$, запишем отдельно (7) в виде (индекс k опущен)

$$\frac{d^2\Phi_0}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d\Phi_0}{d\xi} + (\kappa^2 - \xi^2) \Phi_0 = 0, \quad (9)$$

где $\kappa^2 = 2m^*E_0r_0^2/\lambda^2$ (поскольку осцилляторный потенциал положителен, энергии одночастичных состояний E_{0k} также положительны). Решение уравнения (9), непрерывное всюду вместе с первой производной, и нормированное на единицу в пространстве $L^2(\mathbb{R}^2)$, имеет асимптотику вида [5]

$$\Phi(\xi) \simeq \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right),$$

при $\xi \rightarrow \infty$. Решения с указанной асимптотикой имеют место при значениях энергии одночастичных состояний $E_0 = \hbar\omega(t+1)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Для основного состояния квантовое число $n = 0$, при этом для определения волновой функции $\Phi(\xi)$ следует использовать численные методы.

Для вычисления энергии связи X^- -триона, определяемой матричным элементом (5), заметим, что рассматриваемый ассоциат содержит две одинаковые квазичастицы, что указывает на необходимость учета обменного взаимодействия между электронами. Следовательно, при составлении трехчастичной волновой функции приближение Хартри оказывается недостаточным. Более достоверные результаты получаются в рамках приближения Хартри–Фока, при котором трехчастичная волновая функция антисимметрична по отношению к перестановке электронов. Поскольку перестановка электронов означает перестановку как их координат, так и их спинов, координатная волновая функция будет разной для синглетного (суммарный спин $S = s_1 + s_2 = 0$) и триплетного ($S = 1$) состояний. Для синглетного состояния волновая функция триона в нулевом приближении имеет вид

$$\Psi_0(r_1, r_2, r_3) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{01}(r_1)\Phi_{02}(r_2) + \Phi_{01}(r_2)\Phi_{02}(r_1))\Phi_{03}(r_3). \quad (10)$$

Волновая функция триона с триплетным состоянием системы электронов тождественно обращается в нуль в соответствии с принципом Паули. Это приводит к выводу о том, что основное состояние X^- -триона соответствует синглетному состоянию пары электронов. Триплетное состояние X^- -триона имеет большую энергию связи, для расчета которой необходимо использовать следующий порядок теории возмущений, следовательно, такой трион будет менее стабильным. Спиновое состояние двухэлектронной подсистемы триона может быть определено по характеру расщепления спектральных линий триона во внешнем магнитном поле: для триона с синглетным состоянием двух электронов суммарный спин может быть только $1/2$, вследствие чего имеет место дублетное расщепление уровней энергии. Для триплетного состояния системы электронов суммарный спин триона может достигать величины $3/2$, что приводит к более сложной картине расщепления уровней.

Заключение

В настоящей работе проведено аналитическое исследование одного из типов квазичастиц, возникающих в электронно-дырочной плазме в полупроводниках — трионов, представляющих собой связанные состояния двух

электронов и дырки — X^- -трионы, исследуемые в настоящей статье, и X^+ -трионы, состоящие из электрона и двух дырок. Указано, что для стабилизации триона необходим либо его захват квантовой точкой, либо наличие магнитного поля. Составлен гамильтониан для X^- -триона, в двумерной гетероструктуре, захваченного точечным дефектом. Найдены асимптотики волновых функций одночастичных состояний и построена волновая функция триона в приближении Хартри–Фока. Приведена использующая найденную волновую функцию формула для расчета энергии связи триона. Отмечено существование двух форм X^- -триона, различающихся значениями суммарного спина электронной подсистемы — орто-трион и пара-трион. Обсуждается возможность экспериментального обнаружения указанных типов трионов.

Литература

1. Давыдов А. С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976. 640 с.
2. Сергеев Р. А., Суриц 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.
3. Lampert M. A. Mobile and immobile effective-mass-particle complexes in nonmetallic solids // *Physical Review Letters*. 1958. Vol. 1. No. 12. P. 450–453.
4. Kheng K., Cox R. T., d' Aubigné M. et al. Observation of negatively charged excitons X^- in semiconductor quantum wells // *Physical Review Letters*. 1993. Vol. 71. No. 11. P. 1752–1756.
5. Семина М. А., Сергеев Р. А., Суриц Р. А. Локализация электронно-дырочных комплексов

на флуктуациях интерфейсов квантовых ям // Физика и техника полупроводников. 2006. Вып. 11. С. 1373–1380.

6. Сибельдин Н. Н. Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках и низкоразмерных структурах // Успехи физических наук. 2017. Т. 187. № 11. С. 1236–1270.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2016, 800 с.

References

1. Davydov, A.S. *Solid state theory*. Nauka, Moscow, 1976. (In Russian)
2. Sergeev, R.A., Suris, R.A. Energy of the ground state of X^- and X^+ -trions in a two-dimensional quantum well with an arbitrary mass ratio. *Physics of a solid*, 2001, vol. 43, iss. 4, pp. 714–718. (In Russian)
3. Lampert, M.A. Mobile and Immobile Effective-Mass-Particle Complexes in Nonmetallic Solids. *Physical Review Letters*, 1958, vol. 1, no. 12, pp. 450–453.
4. Kheng, K., Cox, R.T., d' Aubigné, M. et al. Observation of negatively charged excitons X^- in semiconductor quantum wells. *Physical Review Letters*, 1993, vol. 71, no. 11, pp. 1752–1756.
5. Semina, M.A., Sergeev, R.A., Suris, R.A. Localization of electron-hole complexes on the fluctuations of quantum well interfaces. *Physics and technology of semiconductors*, 2006, iss. 11, pp. 1373–1380. (In Russian)
6. Sibeldin, N.N. Electron-hole liquid in semiconductors and low-dimensional structures. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* [Successes of physical sciences], 2017, vol. 187, no. 11, pp. 1236–1270. (In Russian)
7. Landau, L.D., Lifshitz, E.M. *Quantum mechanics. Nonrelativistic theory*. Fizmatlit, Moscow, 2016. (In Russian)