

Ф И З И К А

УДК 538.915

DOI: 10.31429/vestnik-16-4-43-49

УРОВНИ ЭНЕРГИИ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННОГО ТРИОНА, ЗАХВАЧЕННОГО КВАНТОВОЙ ТОЧКОЙ

Андреева А. Р., Тумаев Е. Н., Рудоман Н. Р.

ENERGY LEVELS AND WAVE FUNCTIONS OF NEGATIVELY CHARGED TRION, CAPTURED BY QUANTUM DOT

A. R. Andreeva, E. N. Tumayev, N. R. Rudoman

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

Abstract. The article considers a system of three quasiparticles of electron-hole plasma of semiconductors localized in the vicinity of a quantum dot in a two-dimensional heterostructure - a negatively charged trion. Neutral quantum dot is described by an oscillator potential. As an additional factor, the magnetic field is taken into account that influences on the semiconductor heterostructure, the intensity vector of which is perpendicular to the hetero layer. The Hamiltonian is drawn up to describe the trion including Coulomb interaction between electrons and a hole which are considered as perturbation in the offered approach. The Hartree-Fock approximation is used to calculate the matrix elements of the Coulomb interaction potential of quasiparticles. The correction to the energy of the ground state of trion is calculated when the electrons included in its composition are in the singlet or triplet state. The method for calculating the bonding energy for the excited state of the trion is specified. It is noted that the approach developed in this article is not applicable for charged quantum dots and, in particular, for impurity ions.

Keywords: electron, hole, quantum dot, oscillator potential, Coulomb interaction, perturbation theory, Hartree-Fock method.

Одной из актуальных проблем современной физики полупроводников является исследование связанных состояний электронов и дырок, как в объемных полупроводниках, так и в гетероструктурах. Стабильность делокализованных состояний достаточно мала из-за малой энергии связи электронов и дырок. Поэтому, подобные исследования проводятся для связанных состояний квазичастиц, локализованных вблизи точечных дефектов, таких как вакансии кристаллической решетки, примесные ионы, квантовые точки. Так в работах [1, 2] исследовались электроны, дырки и связанные состояния электронов и дырок (экситоны) в полупроводниковых структурах, содержащих квантовые точки. Структура экситонов изучена достаточно подробно как в молекулярных, так и в полупроводниковых кристаллах [3]. В частности, к настоящему времени рассчитан спектр уровней энергии

экситона [4]. Однако для более сложных образований, состоящих из электронов и дырок, имеется гораздо меньше сведений. Простейшие связанные состояния трех квазичастиц (трион), содержащие два электрона и дырку или электрон и две дырки, являются весьма нестабильными из-за отсутствия электронейтральности, что затрудняет их обнаружение. Расчёт спектра энергии триона может быть проведен теми же методами, что и расчёт отрицательно заряженного иона водорода с той лишь разницей, что массы электронов и дырок сопоставимы по величине, в то время как в атоме водорода положительно заряженное ядро можно считать неподвижным. В связи с этим возникает задача вычисления волновой функции и уровней энергии положительно и отрицательно заряженного трионов. В работе [5] была предпринята попытка выбора волновой функции [6–8] электронов и дыр-

Андреева Алина Руслановна, студентка физико-технического факультета Кубанского государственного университета; e-mail: alina.and@yandex.ru.

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

Рудоман Нэлли Радиковна, старший преподаватель кафедры оптоэлектроники Кубанского государственного университета; e-mail: rudnel@rambler.ru.

ки для отрицательно заряженного триона в приближении Хартри [9].

Настоящая статья является продолжением этой работы. В вышеуказанной работе на основании предложенного в ней гамильтониана, включающего потенциалы осцилляторной ямы, моделирующей квантовую точку, и кулоновские потенциалы взаимодействия квазичастиц друг с другом, была выбрана пробная волновая функция в приближении Хартри. Такое приближение является вполне корректным, однако его точность меньше, чем в приближении Хартри–Фока, которое учитывает обменное взаимодействие между тождественными частицами. Для отрицательно заряженного триона такими частицами являются электроны, поэтому волновая функция триона, как трехчастичной системы, должна быть симметризована либо антисимметризована по координатам электронов. Выбор симметричной или антисимметричной комбинации волновой функции двухэлектронной системы производится в зависимости от её спинового состояния. Система двух электронов может находиться либо в синглетном состоянии с суммарным спином равным нулю, либо в триплетном состоянии с суммарным спином равным единице. Синглетное состояние (S) антисимметрично по отношению к спиновым переменным, поэтому координатная часть волновой функции системы двух электронов должна быть симметричной

$$\begin{aligned} \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1)), \quad (1) \end{aligned}$$

где $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — радиус векторы точек, в которых находятся первый и второй электроны, номера электронов обозначены индексами у волновых функций. В частности, волновая функция $\psi_1(\mathbf{r}_1)$ соответствует первому электрону, находящемуся в точке с радиус-вектором \mathbf{r}_1 ; индекс «S» у двухэлектронной волновой функции $\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ обозначает их синглетное состояние. Аналогично, триплетное состояние (T) симметрично по спиновым переменным, поэтому волновая функция должна быть антисимметричной

$$\begin{aligned} \psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1)). \quad (2) \end{aligned}$$

Как и в работе [5], будем считать, что квазичастицы, составляющие трион, находятся в постоянном магнитном поле, тогда гамильтониан отрицательно заряженного триона можно записать в виде.

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_e^*} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_e^*} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{2m_h^*} + \\ &\quad \frac{m_e^* \omega_0^2 r_1^2}{2} + \frac{m_e^* \omega_0^2 r_2^2}{2} + \frac{m_h^* \omega_0^2 r_3^2}{2} + \\ &\quad \frac{1}{8} m_e^* \omega_c^2 r_1^2 + \frac{1}{8} m_e^* \omega_c^2 r_2^2 + \frac{1}{8} m_h^* \omega_c^2 r_3^2 + \\ &\quad \frac{1}{2} \hbar \omega_c L_z + \frac{1}{2} g^* \frac{m_e^*}{m_e} S_z \hbar \omega_c + \frac{1}{2} g^* \frac{m_h^*}{m_e} S_z \hbar \omega_c + \\ &\quad \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|}, \quad (3) \end{aligned}$$

где через $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3$ обозначены импульсы электронов и дырки соответственно; эффективные массы квазичастиц обозначены через m_e^*, m_h^* для электронов и дырки соответственно.

Частота колебаний квазичастиц в осцилляторном потенциале квантовой точки обозначена через ω_0 . При этом будем считать, что она одинакова как для электронов, так и для дырки. Циклотронная частота вращения квазичастиц в магнитном поле обозначена через ω_c . Проекция углового момента квазичастиц на ось z — L_z , при использовании полярных координат $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, где \hbar постоянная Планка, φ — полярный угол. Буквой g^* обозначен эффективный g -фактор, обычная масса электрона обозначена через m_e . Компонента оператора спина S_z записана следующим образом

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

где σ_z — матрица Паули, e — фундаментальный заряд, $\mathbf{r}_i, i = 1, 2, 3$ — радиус-векторы электронов и дырки соответственно, r_i — длины этих векторов.

Анализ связанного состояния двух электронов и дырки, захваченных квантовой точкой, ограничим практически важным случаем полупроводниковой гетероструктуры, в связи с чем движения квазичастиц носят двумерный характер. Рассмотрение трионов в объемных структурах может быть проведено аналогично двумерному случаю. В целях упрощения расчётов пренебрежём в (3) слага-

емыми, связанными с взаимодействием спинов электронов и дырки с внешним магнитным полем, оставив только взаимодействия с ним заряженных квазичастиц. Поскольку складываемые в гамильтониане, отвечающие движению квазичастиц в осцилляторном потенциале и магнитном поле имеют одинаковую структуру, введем эффективную частоту осцилляции ω при помощи равенства

$$\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4} = \omega^2.$$

После такого упрощения задачи невозмущенный гамильтониан H_0 принимает вид

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_e^*} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_e^*} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{2m_h^*} + \frac{m_e^*\omega^2 r_1^2}{2} + \frac{m_e^*\omega^2 r_2^2}{2} + \frac{m_h^*\omega^2 r_3^2}{2}. \quad (4)$$

Локализованный трион, удерживаемый осцилляторным потенциалом квантовой точки, таков, что составляющие его квазичастицы совершают финитные движения, которые остаются таковыми при учете кулоновского взаимодействия между электронами и дырками. В связи с этим рассматривается это взаимодействие как возмущение. Потенциал взаимодействия между квазичастицами равен

$$V_{eeh}(r_1 r_2 r_3) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|}. \quad (5)$$

В дальнейшем этот потенциал будем обозначать через $V = V(r_1 r_2 r_3)$.

Энергия триона складывается из суммы энергий электронов $E_1^{(e)}$, $E_2^{(e)}$, дырки $E_3^{(h)}$ и энергии взаимодействия между ними $E_{вз}$

$$E = E_1^{(e)} + E_2^{(e)} + E_3^{(h)} + E_{вз}. \quad (6)$$

Исходя из того, что кулоновское взаимодействие не меняет финитного характера движения квазичастиц, считаем энергию взаимодействия $E_{вз}$ малой по сравнению с энергиями $E_1^{(e)}$, $E_2^{(e)}$, $E_3^{(h)}$. Энергия взаимодействия $E_{вз}$ вычисляется как матричный элемент потенциалов взаимодействия $V(r_1 r_2 r_3)$, найденный с помощью волновой функции невозмущенной системы. Волновые функции

$\psi(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3)$ невозмущенной системы выбираем в приближении Хартри–Фока с учетом свойств симметрии двухэлектронной волновой функции (1)–(2). Для синглетного состояния волновую функцию триона выбирают в виде

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_3(\mathbf{r}_3). \quad (7)$$

Для триплетного состояния

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_3(\mathbf{r}_3), \quad (8)$$

где $\psi_3(\mathbf{r}_3)$ — волновая функция дырки. Волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера $H_0 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = E_0 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$. Поскольку, гамильтониан невозмущенной системы H_0 складывается из суммы гамильтонианов, описывающих каждую из квазичастиц, стационарное уравнение Шредингера распадается на три уравнения.

Так для первого электрона стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_e^*} \psi_1(\mathbf{r}_1) + \frac{m_e^*\omega^2 r_1^2}{2} \psi_1(\mathbf{r}_1) = E_1^{(e)} \psi_1(\mathbf{r}_1). \quad (9)$$

Аналогичные уравнения имеют место для волновой функции $\psi_2(\mathbf{r}_2)$ и энергии второго электрона $E_2^{(e)}$, а также для волновой функции $\psi_3(\mathbf{r}_3)$ и энергии $E_3^{(h)}$ дырки. Явный вид оператора квадрата импульса в двумерном пространстве в полярных координатах

$$\mathbf{p}_1^2 = -\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Заметим, что

$$-\frac{\hbar}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \frac{l_z^2}{2m_e^*}.$$

Учитывая, что оператор l_z^2 коммутирует с гамильтонианом

$$\mathbf{p}_1^2 + \frac{m_e^*\omega^2 r_1^2}{2},$$

волновую функцию одиночной квазичастицы (первого электрона) можно выбрать в виде

$$\psi_1(r_1) = \psi_1(r_1 \varphi_1),$$

где

$$\psi_1(r_1 \varphi_1) = R(r_1) \Phi(\varphi_1).$$

Через $R(r_1)$ обозначена радиальная часть волновой функции одиночного электрона, а через $\Phi(\varphi_1)$ — угловая часть волновой функции, которая является собственной функцией оператора l_z и выбирается в нормированном виде

$$\Phi(\varphi_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_1\varphi_1} \quad (10)$$

Квантовое число m_1 , имеющее смысл в проекции момента импульса электрона на Oz , перпендикулярную гетерослою, принимает целочисленное значение. Тогда уравнение Шредингера для первого электрона примет вид

$$R_1'' + \frac{1}{r} R_1' - \frac{m_1^2}{r^2} R_1 + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \left(E_1^{(e)} - \frac{m_e^* \omega^2 r_1^2}{2} R_1 \right) = 0. \quad (11)$$

Уравнение Шредингера для соответствующих радиальных частей волновой функции φ_2, φ_3 записывается аналогично. Решая (11), находим волновую функцию и энергию основного состояния

$$E_1^{(e)} = \hbar\omega(n_r + m_1 + 1),$$

где n_r — радиальное квантовое число, принимающее целочисленные значения 0, 1, 2 и т.д. Волновая функция $R(r_1)$ выражается в виде произведения многочлена на функцию

$$e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}},$$

где

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega}}$$

— константа, имеющая размерность длины. Явный вид радиальной волновой функции $R(r_1)$ будет приведён ниже для состояний квазичастиц с равным нулю моментом импульса (s-состояний), поскольку основное состояние триона складывается из основных состояний частиц, находящихся именно в таком состоянии каждая.

Волновая функция и уровни энергии для квазичастиц 2 и 3 имеют аналогичный вид. Для расчёта энергии взаимодействия квазичастиц триона в основном состоянии вычислим матричный элемент оператора взаимодействия $\langle \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) | V | \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \rangle$.

Энергия взаимодействия складывается из энергии взаимодействия двух электронов и энергии взаимодействия каждого электрона с дыркой, соответственно этому потенциальная энергия взаимодействия V складывается из потенциальной энергии взаимодействия электронов между собой и потенциальной энергии взаимодействия каждого электрона с дыркой $V = V_{12} + V_{13} + V_{23}$. Потенциальная энергия взаимодействия двух электронов равна

$$V_{12} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{e^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}},$$

где φ_1, φ_2 — полярные углы для первого и второго электрона соответственно, а $\varphi_1 - \varphi_2$ — угол между векторами $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Разложение потенциала V_{12} по полиномам Лежандра имеет вид

$$V_{12} = \frac{e^2}{r_>} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r_<^n}{r_>^n} P_n(\cos(\varphi_1 - \varphi_2)), \quad (12)$$

где $r_<, r_>$ — меньшая или большая величина из $r_1 r_2$; P_n — полином Лежандра.

Далее используем формулу сложения для полиномов Лежандра

$$P_n(\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 + \sin \varphi_1 \sin \varphi_2) = P_n(\cos \varphi_1) P_n(\cos \varphi_2) + 2 \sum_{m=1}^n (-1)^m P_n^{-m}(\cos \varphi_1) P_n^m(\cos \varphi_2), \quad (13)$$

где P_n^m — присоединенные полиномы Лежандра.

Для вычисления матричного элемента потенциала электрон-электронного взаимодействия используем формулу (12). Угловые части одночастичных волновых функций в s-состояниях отвечают значениям квантовых чисел $m_1 = m_2 = m_3 = 0$ и они равны. При этом предположении

$$\Phi(\varphi_1) = \Phi(\varphi_2) = \Phi(\varphi_3) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Тогда в матричный элемент потенциала V_{12} даст вклад только слагаемое $P_n(\cos \varphi_1) P_n(\cos \varphi_2)$. Далее при интегрировании по углам φ_1, φ_2 , которое производится при вычислении матричного элемента V_{12} , в

силу соотношения ортогональности полиномов Лежандра следует ограничиться случаем $n = 0$. Тогда матричный элемент

$$\langle \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) | V | \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \rangle = \langle \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V | \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle$$

для синглетного состояния. Интегрирование по координатам дырки \mathbf{r}_3 даёт единицу в силу условия нормировки одночастичной волновой функции $\psi_3(\mathbf{r}_3)$. Для триплетного состояния матричный элемент имеет аналогичную структуру.

Поскольку волновая функция синглетного состояния $\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ выбирается равной (1), вычислим матричный элемент следующего вида

$$\begin{aligned} \langle \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) | V_{12} | \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \rangle = \\ = \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_2^*(\mathbf{r}_2) V_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \\ \times \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) d^2(\mathbf{r}_1) d^2(\mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (14)$$

где $d^2(\mathbf{r}_1) = \mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_1 d\varphi_1$, $d^2(\mathbf{r}_2) = \mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_2 d\varphi_2$.

Интегрирование по углам $\varphi_1 \varphi_2$ в выражении (14) опять даёт единицу в силу выбранной выше нормировки угловых частей волновых функций. Следовательно, матричный элемент можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle V_{12} \rangle = e^2 \int_0^\infty \frac{R^2(r_1)}{r_1} \int_0^{r_1} R^2(r_2) r_2 dr_2 r_1 dr_1 + \\ + e^2 \int_0^\infty R^2(r_1) \int_{r_2}^\infty \frac{R^2(r_2)}{r_2} r_2 dr_2 r_1 dr_1. \end{aligned}$$

Первое слагаемое отвечает случаю, когда $r_> = r_1$, $r_< = r_2$, второе слагаемое — случаю, когда $r_> = r_2$, $r_< = r_1$. Поскольку волновая функция $R(r)$ имеет асимптотику

$$R(r) \approx e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}}$$

при больших r , второе слагаемое экспоненциально мало по сравнению с первым. Следовательно,

$$\langle V_{12} \rangle = e^2 \int_0^\infty R^2(r_1) r_1 dr_1 \int_0^{r_1} \frac{R^2(r_2) r_2 dr_2}{r_1}.$$

В интеграле по переменной r_2 значение $R^2(r_2)$ можно заменить на квадрат нормировочного множителя, поскольку в области $0 \leq r_2 \leq r_1$ значение экспоненты достаточно близко к единице (превышает e^{-1}). Для более точного вычисления радиальной части матричного элемента стоит использовать численные методы.

Радиальные части волновых функций первого и второго электронов $R(r_1)$ и $R(r_2)$ находим, используя теорему о нулях волновой функции системы, совершающей финитные движения: волновая функция n -го возбужденного состояния системы имеет ровно n нулей, волновая функция основного состояния нулей не имеет. Из условия нормировки волновой функции

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r dr = 1$$

и того, что

$$\int_0^\infty e^{-\frac{r^2}{r_0^2}} r dr = \frac{1}{2} r_0^2,$$

находим нормированную радиальную часть волновой функции

$$R(r) = \frac{\sqrt{2}}{r_0} e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}}.$$

Итак, матричный элемент потенциала V_{12} равен

$$\begin{aligned} \langle \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) | V_{12} | \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \rangle = \\ = \left(\frac{\sqrt{2}}{r_0} \right)^4 e^2 \int_0^\infty e^{-\frac{r_1^2}{r_0^2}} \frac{r_1^2}{2r_1} r_1 dr_1. \end{aligned}$$

Вводя переменную

$$t = \frac{r_1^2}{r_0^2}, \quad r_1 = r_0 \sqrt{t}, \quad dr = \frac{1}{2} r_0 t^{-\frac{1}{2}} dt,$$

приводим выражение матричного элемента к виду

$$\langle V_{12} \rangle = \frac{1}{2} \frac{4}{r_0^4} \frac{1}{2} r_0^3 e^2 \int_0^\infty e^{-t} t^{\frac{1}{2}} dt.$$

Последний интеграл равен $\Gamma(3/2) = 1/2\sqrt{\pi}$, где $\Gamma(3/2)$ — гамма-функция Эйлера. Окончательно значение матричного элемента V_{12} равно

$$\langle V_{12} \rangle = \frac{e^2 \sqrt{\pi}}{r_0^2}. \quad (15)$$

Матричный элемент потенциала V_{12} для синглетного состояния двух электронов равен

$$\begin{aligned} \langle \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V_{12} | \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle = \\ = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \right. \\ \left. + \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1) | V_{12} | \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \right. \\ \left. + \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1) \right\rangle. \end{aligned}$$

Четыре слагаемых, возникающих при вычислении этого матричного элемента одинаковы, поскольку индексы 1 и 2 у электронов относятся к их спиновым состояниям (спин первого электрона равен $+\frac{\hbar}{2}$ а спин второго электрона равен $-\frac{\hbar}{2}$ или наоборот). Возникающий множитель 2 компенсирует множители $\frac{1}{\sqrt{2}}$, поэтому

$$\langle \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V_{12} | \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle = \frac{e^2 \sqrt{\pi}}{r_0} \frac{1}{2}.$$

Для триплетного состояния двух электронов, у которого волновая функция дается формулой (2), из-за наличия знака «-» происходит взаимная компенсация четырех слагаемых и соответствующий матричный элемент $\langle \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V_{12} | \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle = 0$. В выражениях (1)–(2) вторые слагаемые справа отвечают обмену квантовыми состояниями между электронами, т.е. дают вклад обменного взаимодействия в матричные элементы потенциала. Итак, для синглетного состояния кулоновское и обменное взаимодействие одинаковы, а для триплетного — противоположны по знаку и уничтожают друг друга. При вычислении матричных элементов потенциалов V_{13} и V_{23} обменные эффекты учитывать не нужно, потому что электроны и дырки являются нетождественными квазичастицами, следовательно, $\langle V_{13} \rangle = \langle V_{23} \rangle = -\frac{e^2 \sqrt{\pi}}{r_0} \frac{1}{2}$. Константа r_0 имеет разные числовые значения для электрона и дырки в силу разной величины их эффективных масс. Энергия взаимодействия между квазичастицами в отрицательно заряженном ионе равна

$$E_{\text{вз}} = \frac{\sqrt{\pi} e^2}{2 r_0^e} - \sqrt{\pi} \frac{e^2}{r_0^h} \quad (16)$$

— для синглетного состояния;

$$E_{\text{вз}} = -\sqrt{\pi} \frac{e^2}{r_0^h} \quad (17)$$

— для триплетного состояния.

Найденное значение энергии взаимодействия представляет собой поправку к энергии основного состояния триона $E = E_0 + E_{\text{вз}}$. Вычисление энергии возбужденных состояний триона производится аналогично, при этом необходимо учесть соответствующие члены в разложении полинома Лежандра (13). Отметим, что, если не учитывать эффект обмена квантовыми состояниями между тождественными квазичастицами, энергия триона в синглетном и триплетном состояниях одинакова, что не согласуется с известными фактами в атомной спектроскопии.

Заключение

В настоящей работе найдена волновая функция и энергия основного состояния для двумерного отрицательно заряженного триона, захваченного двумерным параболическим потенциалом квантовой точки. Аналогичные вычисления могут быть проделаны для положительно заряженного триона. Метод расчета волновой функции и энергии связи, предложенный в настоящей статье, может быть обобщен на трион, захваченный трехмерным осцилляторным потенциалом. Следует отметить, что предлагаемый в данной работе метод вычисления волновой функции триона нельзя обобщить на кулоновский потенциал квантовой точки или примесного центра, в частности, кулоновский потенциал заряженной вакансии, поскольку область её применимости ограничена финитным движением квазичастиц, составляющих трион. Исследование трионов, захваченных вакансиями, равно как и делокализованных трионов, требует другого подхода.

Литература

1. Ткач Н.В., Маханец М.А., Зегря Г.Г. Электроны, дырки и экситоны в сверхрешетке цилиндрических квантовых точек с предельно слабой связью квазичастиц между слоями квантовых точек // Физика техника полупроводников. 2002. Т. 36. Вып. 5. С. 543–549.
2. Покутний С.И. Экситонные состояния из пространственно-разделенных электрона и дырки в полупроводниковых квантовых точках // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. Вып. 11. С. 44–47.
3. Koch S.W., Kira M., Khitrova G., Gibbs H.M. Semiconductors excitons in new light // Nature materials. 2006. Iss. 5. P. 523–531.

4. Monemar B., Lindefelt U., Chen W.M. Electronic structure of bound excitons in semiconductors // *Physica B+C*. 1987. Vol. 146. Iss. 1–2. P. 256–285.
5. Беженар М.В., Кургачев А.Ю., Лигачев Д.В., Тумаев Е.Н. Построение пробной волновой функции X^- -триона в удерживающем потенциале квантовой точки в постоянном магнитном поле // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2018. Т. 15. № 1. С. 37–40.
6. 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. Iss. 11. P. 1752–1756.
7. 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.
8. Lampert M.A. Mobile and immobile effective-mass particle complexes in nonmetallic solids // *Phys. Rev. Lett.* 1958. Vol. 1. Iss. 12. P. 450–453.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2019. 800 с.
3. Koch, S.W., Kira, M., Khitrova, G., Gibbs, H.M. Semiconductors excitons in new light. *Nature materials*, 2006, iss. 5, pp. 523–531.
4. Monemar B., Lindefelt U., Chen W.M. Electronic structure of bound excitons in semiconductors. *Physica B+C*, 1987, vol. 146, iss. 1–2, pp. 256–285.
5. Bezhenar, M.V., Kurgatchov, A.Y., Ligachov, D.V., Tumayev, E.N. Postroenie probnoy volnovoy funktsii X^- -triona v uderzhivayushchem potentsiale kvantovoy tochki v postoyannom magnitnom pole [Construction of the trial wave function of the X^- trion in the retarding potential of a quantum dot in a constant magnetic field]. *Ekologicheskiiy vestnik nauchnykh tsentrov Chernomorskogo ekonomicheskogo sotrudnichestva* [Ecological Bulletin of Research Centers of Black Sea Economic Cooperation], 2018, vol. 15, no. 1, pp. 37–40.
6. 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, iss. 11, pp. 1752–1756.
7. Sergeev, R.A., Suris R.A. nergiya osnovnogo sostoyaniya X^- i X^+ -trionov v dvumernoy kvantovoy yame pri proizvol'nom sootnoshenii mass [The ground state energy of X^- and X^+ -trions in a two-dimensional quantum well at an arbitrary mass ratio]. *Fizika tverdogo tela* [Physics Of The Solid State], 2001, vol. 43, iss. 4, pp. 714–718. (In Russian)

References

1. Tkach, N.V., Makhanets, A.M., Zegrya, G.G. Electrons, holes, and excitons in a two-dimensional surerlattice of culindrical quantum dots. *Semiconducors*, 2002, vol. 36, iss. 5, pp. 543–549. (In Russian)
2. Pokutnyi S.Y. Eksitonnye sostoyaniya iz prostranstvenno-razdelennykh elektrona i dyrki v poluprovodnikovyykh kvantovykh tochkakh. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Journal of Technical Psysics], 2015, vol. 85, iss. 11, pp. 44–47. (In Russian)
8. Lampert, M.A. Mobile and immobile effective-mass particle complexes in nonmetallic solids. *Phys. Rev. Lett.*, 1958, vol. 1. iss. 12, pp. 450–453.
9. Landau, L.D., Lifshitz, E.M. *Teoreyicheskaya fizika. Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya)* [Theoretical physics. Quantum mechanics (nonrelativistic theory)]. Fizmatlit, Moscow, 2019. (In Russian)