

# Энергия связи экситона и $X^{+-}$ , $X^{-}$ -трионов в одномерных системах

© М.А. Семина<sup>¶</sup>, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис

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

(Получена 13 мая 2008 г. Принята к печати 21 мая 2008 г.)

Вариационным методом изучены состояния экситонов и трионов в полупроводниковых квантовых нитях. Предложены простые пробные функции, обеспечивающие хорошую точность в широком диапазоне изменения радиуса нитей при произвольном соотношении между эффективными массами носителей заряда. Точность результатов, полученных вариационным методом, проконтролирована с помощью численной диагонализации гамильтониана экситонов и положительно и отрицательно заряженных трионов. Получены аналитические асимптотики для энергий связи экситонов и трионов в узких квантовых нитях. Структура возбужденных состояний  $X^{+}$ -триона проанализирована в рамках адиабатического приближения.

PACS: 71.35-у, 73.21.Нб

## 1. Введение

Оптические свойства полупроводников и полупроводниковых гетероструктур вблизи края поглощения определяются электрон-дырочными комплексами с малым числом частиц. Простейшими такими комплексами являются экситоны и трионы. Последние представляют собой связанные состояния трех частиц: двух электронов и дырки ( $X^{-}$ -трион) и двух дырок и электрона ( $X^{+}$ -трион). В объемных материалах наблюдение свободных трионов затруднено вследствие малой их энергии связи, низкой концентрации и большой спектральной ширины линии. Понижение размерности системы резко увеличивает эффекты взаимодействия между частицами, что ведет к увеличению энергии связи таких комплексов. Например, при переходе от объемного полупроводника к двумерной квантовой яме энергия связи экситона возрастает в 4 раза, а энергия связи трионов может увеличиваться на порядок [1–3]. Это позволяет наблюдать трионы в полупроводниковых квантовых ямах [4], структурах с квантовыми точками [5,6] и квантовыми нитями [7].

К настоящему моменту трионы в одномерных и квазиодномерных системах изучены крайне слабо как экспериментально, так и теоретически. Нам известно лишь несколько теоретических работ, в которых выполнен численный расчет энергии связи трионов [8,9]. Расчеты в этих работах выполнены путем численной диагонализации гамильтониана электрон-дырочного комплекса, и громоздкость использованных методов не позволяет проследить зависимости энергии связи и строения трионов от параметров структуры в широком диапазоне значений последних.

Цель нашей работы состоит в вариационном исследовании структуры  $X^{-}$ - и  $X^{+}$ -трионов в квазиодномерных системах. Преимущество такого подхода заключается в том, что удастся установить физически наглядную картину строения комплексов, при этом, однако, возможна некоторая потеря точности. Мы предлагаем относительно простые пробные функции, которые, как

оказывается, обеспечивают точность, весьма близкую к точности прямой численной диагонализации гамильтониана. В предельном случае очень тяжелых дырок энергия связи  $X^{+}$ -триона также найдена в адиабатическом приближении.

В разд. 2 обсуждаются особенности кулоновского взаимодействия в квазиодномерных полупроводниковых нитях, формулируется модель эффективного потенциала взаимодействия и подробно анализируется зависимость энергии связи экситона от поперечного радиуса нити. Разд. 3 посвящен вариационным расчетам зависимости энергии связи  $X^{+-}$ ,  $X^{-}$ -трионов в квантовых нитях от радиуса нити и отношения масс электрона и дырки, а разд. 4 — оценке точности предложенной вариационной функции. В разд. 5 основное и возбужденные состояния  $X^{+}$ -трионов исследуются в рамках адиабатического приближения.

## 2. Кулоновское взаимодействие в квазиодномерных системах

Особенность теоретического описания электрон-дырочных комплексов (в частности экситонов и трионов) в квантовых нитях заключается в отсутствии одномерного предела: энергия связи комплексов с кулоновским взаимодействием  $\sim 1/r$ , где  $r$  — расстояние между частицами, логарифмически расходится при стремлении радиуса нити к нулю. Подобная ситуация возникает в объемных полупроводниках в сильном магнитном поле, так как в плоскости, перпендикулярной полю, движение носителей квантовано, а вдоль поля — свободно. Это обстоятельство свидетельствует о необходимости исследования зависимости энергии связи экситонов и трионов от радиуса квантовой нити.

Рассмотрим экситон (электрон-дырочную пару) в цилиндрически симметричной квантовой нити. Гамильтониан системы удобно представить в безразмерных единицах, введя трехмерный боровский радиус  $a_B = \hbar^2 \epsilon / \mu e^2$  в качестве единицы длины и трехмерный

<sup>¶</sup> E-mail: msemina@gmail.com

экситонный ридберг  $Ry = \mu \epsilon^4 / 2\epsilon^2 \hbar^2$  (здесь  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость,  $\mu$  — приведенная масса электрона и дырки) как единицу энергии:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma+1} \Delta_e - \frac{\sigma}{\sigma+1} \Delta_h - \frac{2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_e(\mathbf{r}_e) + V_h(\mathbf{r}_h), \quad (1)$$

где  $\sigma = m_e/m_h$  — отношение эффективных масс электрона ( $m_e$ ) и дырки ( $m_h$ ),  $\mathbf{r}_e$  и  $\mathbf{r}_h$  — их трехмерные координаты,  $V_e(\mathbf{r}_e)$  и  $V_h(\mathbf{r}_h)$  — потенциалы квантовой нити для электрона и дырки соответственно,  $\Delta_e$  и  $\Delta_h$  обозначают трехмерные операторы Лапласа по координатам электрона и дырки. Эффектами сложной структуры валентной зоны мы пренебрегли.

Пусть энергия размерного квантования электрона и дырки в направлении, перпендикулярном оси нити,  $E_\perp$ , много больше характерной энергии кулоновского взаимодействия между частицами,  $E_c$ :

$$E_\perp \gg E_c, \quad (2)$$

что выполняется при  $R < a_B$ , где  $R$  — радиус квантовой нити. Тогда координаты, описывающие поперечное движение частиц, можно отделить, а волновую функцию системы записать как

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_e^0(\boldsymbol{\rho}_e) \Psi_h^0(\boldsymbol{\rho}_h) \Phi(z_e, z_h), \quad (3)$$

где  $\boldsymbol{\rho}_e$  и  $\boldsymbol{\rho}_h$  — поперечные, а  $z_e$  и  $z_h$  — продольные координаты электрона и дырки соответственно. Функции  $\Psi_e^0(\boldsymbol{\rho}_e)$  и  $\Psi_h^0(\boldsymbol{\rho}_h)$  — волновые функции основного состояния поперечного движения, рассчитанные без учета кулоновского взаимодействия между носителями заряда.

После усреднения гамильтониана (1) по переменным  $\boldsymbol{\rho}_e$ ,  $\boldsymbol{\rho}_h$  и отделения свободного движения центра масс экситона получаем следующий гамильтониан относительного движения электрона и дырки:

$$\hat{H}_{\text{ex}} = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \hat{V}_c(z). \quad (4)$$

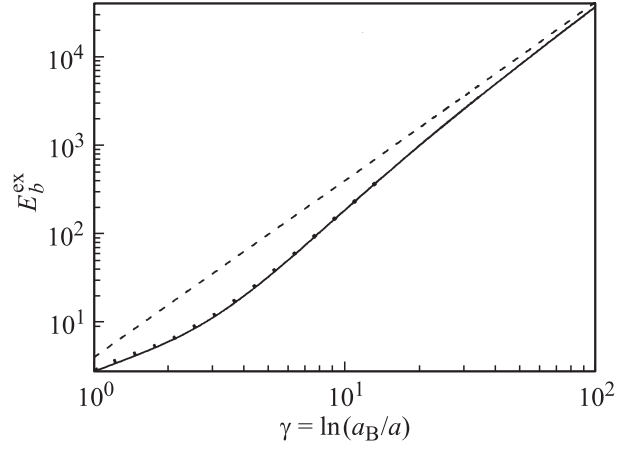
Здесь  $z = z_e - z_h$  и

$$\hat{V}_c(z) = -\int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2}{\sqrt{(\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h)^2 + z^2}} \times |\Psi_e^0(\boldsymbol{\rho}_e)|^2 |\Psi_h^0(\boldsymbol{\rho}_h)|^2 \rho_e \rho_h d\rho_e d\rho_h \quad (5)$$

— эффективный одномерный потенциал взаимодействия между электроном и дыркой. Заметим, что при выполнении условия (2) задача о нахождении собственных уровней энергии гамильтониана (4) оказывается аналогичной задаче об атоме водорода в сильном магнитном поле [10].

На больших по сравнению с радиусом нити  $R$  расстояниях между носителями эффективный потенциал (5) сводится к одномерному кулоновскому:

$$\hat{V}_c(z) \rightarrow -\frac{2}{|z|}, \quad |z| \gg R. \quad (6)$$



**Рис. 1.** Энергия связи экситона в зависимости от эффективного радиуса квантовой нити  $a$ . Сплошная кривая — точное решение вариационной задачи, штриховая — приближенная зависимость (10), точки — зависимость, полученная с помощью численной диагонализации гамильтониана (4) с неупрощенным потенциалом (5).

При выполнении условия (2) потенциал (5) отличается от асимптотики (6) только при  $|z| \ll R$ , при этом масштаб волновой функции относительного движения электрон-дырочной пары в экситоне  $a_{\text{ex}}$  много больше радиуса нити:  $a_{\text{ex}} \gg R$ . Это означает, что в области  $|z| \gg R$  важна лишь интегральная мощность потенциала взаимодействия, а его конкретный вид не существен. Поэтому в дальнейших расчетах мы применим широко используемое приближение для эффективного потенциала взаимодействия между электроном и дыркой (см. [11–17]).

$$\hat{V}_{\text{eff}}(z, a) = -\frac{2}{\sqrt{z^2 + a^2}}, \quad (7)$$

где параметр  $a$  играет роль эффективного радиуса квантовой нити и пропорционален  $R$ . Расчет показывает, что для квантовой нити с бесконечным барьером, который мы будем рассматривать в дальнейшем,  $a \approx R/2$ . Отметим, что выбор эффективного потенциала взаимодействия в виде (7) не единственный (см., например, [18,19]).

Для нахождения энергии связи экситонов (и трионов) в системе с потенциалом взаимодействия между носителями заряда в виде (7) мы будем использовать вариационный метод с пробной функцией, обладающей небольшим числом подгоночных параметров. Для экситона мы выберем простейшую пробную функцию  $\varphi_\alpha(z)$  вида

$$\varphi_\alpha(z) = \exp(-\alpha|z|) \quad (8)$$

с единственным подгоночным параметром  $\alpha$  (здесь и далее нормировочные константы опущены). Зависимость энергии связи экситона  $E_b^{\text{ex}}$  от параметра  $\gamma = \ln(a_B/a)$ , полученная вариационным методом, показана на рис. 1

сплошной кривой. Для сравнения на том же рисунке точками показана точная зависимость энергии связи экситона, полученная с помощью численной диагонализации гамильтониана (4) с неупрощенным потенциалом (5) в предположении  $a = R/2$ . Видно, что даже простейшая пробная функция (8) позволяет получить энергию связи экситона с хорошей точностью при любых значениях  $\gamma \gtrsim 1$ . Даже в области  $\gamma \sim 1$ , где функция (8) наименее точна, относительная погрешность вычисления энергии связи составляет не более 6%.

В пределе

$$\gamma \gg 1 \quad (9)$$

характерный размер пробной волновой функции (8), минимизирующей гамильтониан,  $a_{\text{ex}} = \gamma^{-1}$  оказывается много больше характерного размера потенциала (7)  $R_{\text{eff}} = e^{-\gamma}$ . Следовательно, потенциал (7) можно рассматривать как  $\delta$ -функциональный, что оправдывает выбор функции (8) в качестве пробной. При выполнении условия (9) энергию связи экситона можно записать в виде

$$E_b^{\text{ex}} = 4\gamma^2 = 4 \ln^2 \left( \frac{a_B}{a} \right). \quad (10)$$

Данная зависимость также показана на рис. 1. Видно, что эта асимптотика реализуется только при очень больших значениях параметра  $\gamma$  ( $\gamma > 50$ ). Это связано с тем, что следующая поправка к (10) убывает логарифмически медленно с ростом  $\gamma$ . Необходимо отметить, что, например, для GaAs уже при значении  $\gamma = 4$  радиус нити оказывается сравнимым с межатомным расстоянием. Следовательно, область, в которой реализуется логарифмический предел (10), представляет лишь теоретический интерес и в реальных полупроводниковых системах не достигается.

### 3. Вариационный расчет энергии связи трионов

В данном разделе мы построим простые вариационные функции, пригодные для нахождения основного состояния  $X^+$ - и  $X^-$ -трионов в квантовых нитях, кулоновское взаимодействие в которых будем описывать потенциалом (7).

Гамильтониан  $X^+$ -триона в такой системе будет следующим:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h1}^2} - \frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h2}^2} - \frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \\ & + \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h1} - z_e, a) + \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h2} - z_e, a) - \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h1} - z_{h2}, a); \end{aligned} \quad (11)$$

напомним, что потенциал  $\hat{V}_{\text{eff}}(z, a) < 0$  является потенциалом притяжения. Заменой переменных

$$z_1 = z_{h1} - z_e, \quad z_2 = z_{h2} - z_e, \quad Z = \frac{z_{h1} + z_{h2} + \sigma z_e}{\sigma + 2}, \quad (12)$$

где  $Z$  — координата центра масс триона, а  $z_{1,2}$  — относительные координаты носителей, можно отделить движение центра масс триона, и для относительного движения носителей получится следующий гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{tr}} = & -\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - 2 \frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\partial}{\partial z_2} \\ & + \hat{V}_{\text{eff}}(z_1, a) + \hat{V}_{\text{eff}}(z_2, a) - \hat{V}_{\text{eff}}(z_1 - z_2, a). \end{aligned} \quad (13)$$

Гамильтониан для  $X^-$ -триона получается с помощью замены  $e \leftrightarrow h$  и  $\sigma \leftrightarrow 1/\sigma$  в гамильтониане  $X^+$ -триона (13).

По аналогии с [20] в качестве пробных функций для  $X^-$ - и  $X^+$ -трионов мы выбрали

$$\begin{aligned} \Psi^s(z_1, z_2) = & [\exp(-\alpha|z_1| - \beta|z_2|) \\ & + \exp(-\alpha|z_2| - \beta|z_1|)] \exp(-\delta||z_1 - z_2| - R_0|) \end{aligned} \quad (14)$$

для описания синглетного состояния трионов, т.е. состояния с полным спином пары тождественных частиц, равным нулю, и симметричной по отношению к перестановкам пространственной функцией, и

$$\begin{aligned} \Psi^t(z_1, z_2) = & (z_1 - z_2) [\exp(-\alpha|z_1| - \beta|z_2|) \\ & + \exp(-\alpha|z_2| - \beta|z_1|)] \exp(-\delta||z_1 - z_2| - R_0|) \end{aligned} \quad (15)$$

для описания триплетного состояния. Подгоночные параметры  $\alpha$ ,  $\beta$  описывают взаимодействие носителей с зарядом противоположного знака, параметры  $\delta$ ,  $R_0$  — взаимодействие носителей одного знака. Далее будет показано, что пробная функция (14) описывает синглетное состояние и  $X^+$ - и  $X^-$ -триона во всем диапазоне изменения отношения эффективных масс электрона и дырки с хорошей точностью.

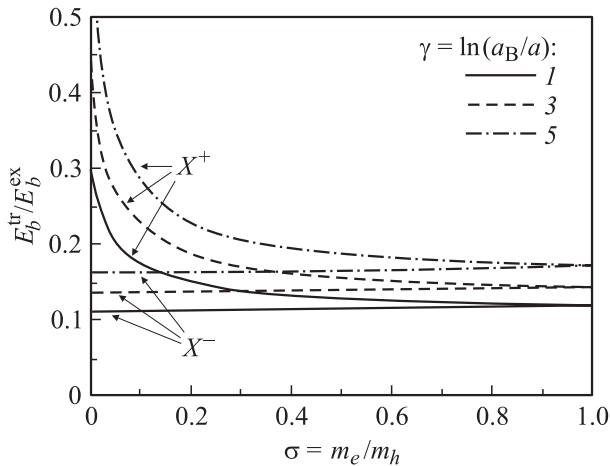
Энергией связи триона называют величину

$$E_b^{\text{tr}} = E_{\text{ex}} + E_i - E_{\text{tr}}, \quad (16)$$

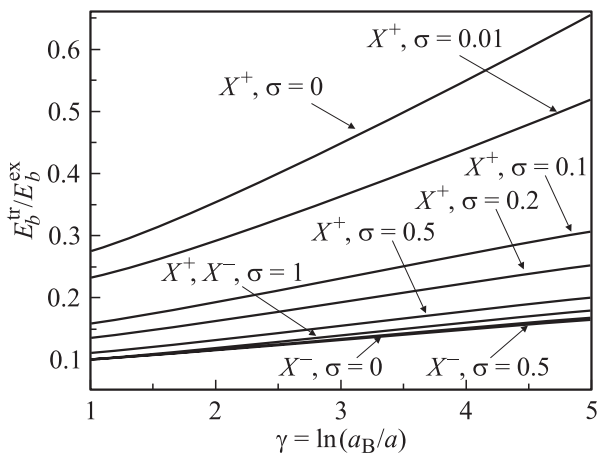
где  $E_{\text{ex}}$  и  $E_{\text{tr}}$  — полные энергии экситона и триона соответственно,  $E_i$  — энергия основного состояния изолированной третьей частицы (электрона в случае  $X^-$ -триона и дырки в случае  $X^+$ -триона). Иными словами, энергия связи триона — это величина, показывающая на сколько понизится полная энергия системы, состоящей из экситона и изолированного носителя, вследствие включения кулоновского взаимодействия между ними. В рассматриваемой системе  $E_i = 0$ , так как вдоль нити движение носителей свободно.

На рис. 2 показаны зависимости отношения энергии связи синглетного состояния  $X^+$ - и  $X^-$ -трионов к энергии связи экситона от отношения эффективных

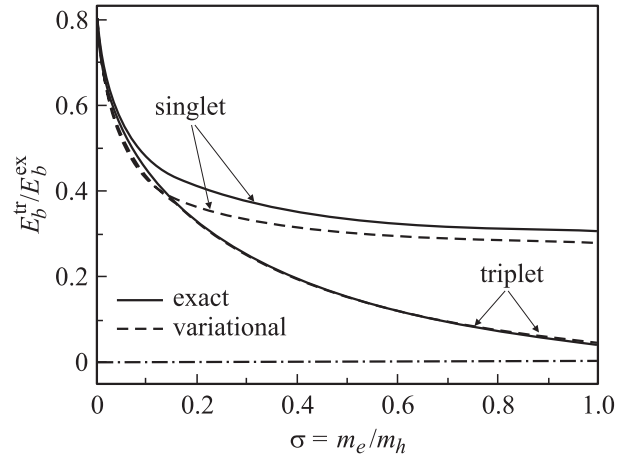
масс электрона и дырки, вычисленные для нескольких значений параметра  $\gamma$  с использованием пробной функции (14). Видно, что энергия связи обоих трионов возрастает с уменьшением эффективного радиуса квантовой нити, что связано с увеличением эффективности кулоновского взаимодействия. Энергия связи  $X^+$ -триона существенно зависит от отношения масс электрона и дырки, энергия связи  $X^-$ -триона, напротив, почти не зависит от отношения масс. В идеальной двумерной квантовой яме характер зависимостей схожий. Однако при изменении значения  $\sigma$  от 1 до 0 энергия связи  $X^-$ -триона в квантовой яме меняется сильнее (возрастает на  $\sim 13$  против  $< 1\%$ ), а  $X^+$ -триона, напротив, слабее (возрастает на  $\sim 120$  против  $> 170\%$  для нити), чем в квантовой нити (см. [21]). В предельном случае



**Рис. 2.** Зависимости отношения энергий связи синглетного состояния  $X^+$ - и  $X^-$ -трионов к энергии связи экситона от отношения эффективных масс электрона и дырки  $\sigma$ , вычисленные для нескольких значений параметра  $\gamma$ . Использовалась пробная функция (14).



**Рис. 3.** Зависимости отношения энергий связи синглетного состояния  $X^+$ - и  $X^-$ -трионов к энергии связи экситона от параметра  $\gamma$  для различных отношений масс электрона и дырки. Кривые, соответствующие  $X^-$ -триону при  $\sigma = 0$  и 0.5, лежат близко друг к другу и на рисунке неразличимы.



**Рис. 4.** Зависимости отношения энергий связи синглетного и триплетного состояний  $X^+$ -триона к энергии связи экситона, вычисленные точно (сплошные кривые) и с использованием пробных функций (14), (15) (штриховые кривые). Все кривые вычислены при  $\gamma = 1$ .

$\gamma \rightarrow \infty$  при  $\sigma \rightarrow 0$  отношения энергии связи триона к энергии связи экситона стремятся к  $E_b^+/E_b^{ex} \rightarrow 3$  и  $E_b^-/E_b^{ex} \rightarrow 0.198$  для  $X^+$ - и  $X^-$ -триона соответственно.

Проследим зависимость энергии связи трионов от радиуса квантовой нити при  $\gamma \gtrsim 1$ , так как именно эта область соответствует наблюдаемым полупроводниковым системам. На рис. 3 показаны отношения энергии связи синглетного состояния  $X^+$ - и  $X^-$ -трионов к энергии связи экситона как функции параметра  $\gamma$  для различных отношений масс электрона и дырки. Из рисунка видно, что найденные зависимости для  $X^-$ -триона при любых значениях  $\sigma$  и для  $X^+$ -триона при  $\sigma > 0.1$  хорошо укладываются на линейную зависимость  $E_b^{+, -}/E_b^{ex} = C_1\gamma + C_2$  с коэффициентами, зависящими от  $\sigma$ .

Зависимость отношения энергии связи триплетного состояния  $X^+$ -триона к энергии связи экситона от отношения эффективных масс электрона и дырки, вычисленная с использованием функций (15) для  $\gamma = 1$ , показана на рис. 4. Аналогичная зависимость для синглетного состояния также показана на рисунке. При стремлении  $\sigma \rightarrow 0$  энергии связи синглетного и триплетного состояний  $X^+$  стремятся к одинаковому пределу. Это связано с тем, что дырки в таком пределе можно рассматривать как классические частицы, поэтому эффекты обменного взаимодействия, которое приводит к расщеплению синглетного и триплетного состояний, ослабевают и ими можно пренебречь. Отметим, что небольшой перегиб в энергиях связи синглетного и триплетного состояний при небольших  $\sigma$  связан с сильно упрощенным выбором пробных функций (14), (15) и самостоятельного физического смысла не несет. Более точный расчет, результаты которого даны далее в разд. 4, показывает, что энергия связи синглетного состояния всегда превышает энергию связи триплетного.

#### 4. Оценка точности вариационного расчета

Для оценки точности результатов, приведенных в разд. 3, был проведен более точный вариационный расчет с большим числом подгоночных параметров. Выполнялась прямая диагонализация матрицы гамильтониана, вычисленной на следующем неортонормированном базисе:

$$\Psi_i(z_1, z_2) = [\exp(-\alpha_i z_1^2) \exp(-\beta_i z_2^2) + \exp(-\alpha_i z_2^2) \exp(-\beta_i z_1^2)] \exp[-\delta_i (z_1 - z_2)^2] \quad (17)$$

для синглетного состояния и

$$\Psi_i(z_1, z_2) = (z_1 - z_2) [\exp(-\alpha_i z_1^2) \exp(-\beta_i z_2^2) + \exp(-\alpha_i z_2^2) \exp(-\beta_i z_1^2)] \exp[-\delta_i (z_1 - z_2)^2] \quad (18)$$

для триплетного. Число базисных функций  $i$  бралось равным 400. Энергия наименьшего состояния затем минимизировалась по наборам параметров  $\alpha_i, \beta_i, \delta_i$ .

Зависимости отношения энергии связи синглетного и триплетного состояний  $X^+$ -триона к энергии экситона при  $\gamma = 1$ , вычисленные с помощью численной диагонализации гамильтониана, сплошными линиями показаны на рис. 4. Сравнение с результатами разд. 3 показывает, что для данного значения  $\gamma$  погрешность результата, полученного с пробной функцией (14), не превышает 10%, а с функцией (15) — 2%. Еще раз отметим, что перехлеста зависимостей энергий связи синглетного и триплетного состояний в более точном расчете нет. Полученные нами результаты также хорошо согласуются с численным расчетом, приведенным в работе [9].

#### 5. Адиабатическое приближение. Возбужденные состояния $X^+$ -триона

В пределе тяжелых дырок,  $\sigma = m_e/m_h \rightarrow 0$ , уравнение Шредингера для  $X^+$ -триона с гамильтонианом (11) можно решать в адиабатическом приближении, отделив быстрое движение электрона от медленного квазиклассического движения дырок. Тогда переменные, описывающие движение электрона, и переменные, описывающие движение дырок, можно разделить. Как и в предыдущем разделе, движение центра масс триона (в адиабатическом приближении им является центр масс пары дырок) считаем независимым от относительного движения носителей. Адиабатический потенциал  $V_{ad}(z_{hh}, a)$ , в котором происходит движение дырок, вычисляется как собственная энергия электрона при фиксированном расстоянии между дырками. Уравнение Шредингера для вычисления адиабатического потенциала записывается

как

$$\left[ -\frac{1}{\sigma + 1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + \hat{V}_{\text{eff}}\left(z_e - \frac{z_{hh}}{2}, a\right) + \hat{V}_{\text{eff}}\left(z_e + \frac{z_{hh}}{2}, a\right) - \hat{V}_{\text{eff}}(z_{hh}, a) \right] \Psi_e(z_e) = [V_{ad}(z_{hh}, a) + E_b^{\text{ex}}] \Psi_e(z_e). \quad (19)$$

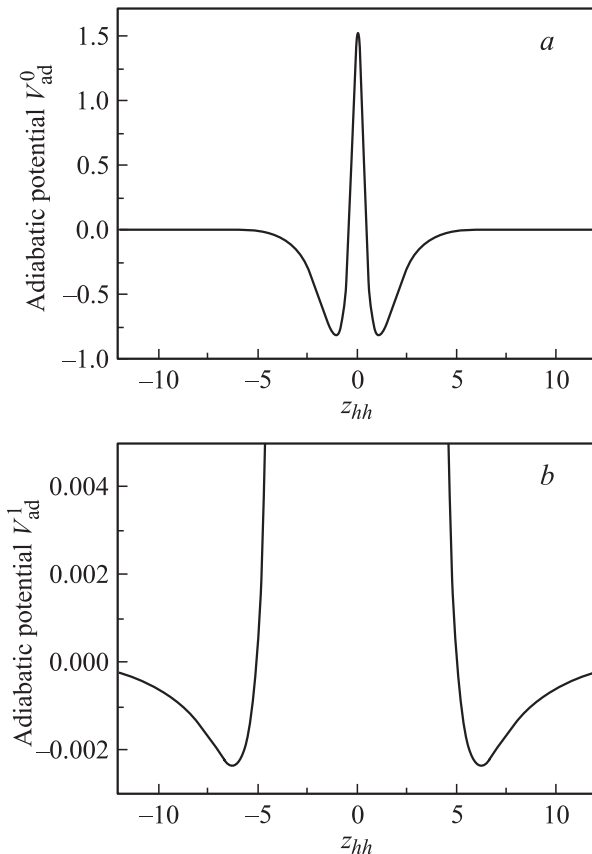
Относительная координата дырок  $z_{hh} = z_{h1} - z_{h2}$  входит в (19) в качестве параметра. Зависимость каждой из собственных энергий уравнения (19) от  $z_{hh}$  представляет собой адиабатический потенциал  $V_{ad}(z_{hh}, a)$ .

Тогда гамильтониан, описывающий относительное движение дырок, имеет вид

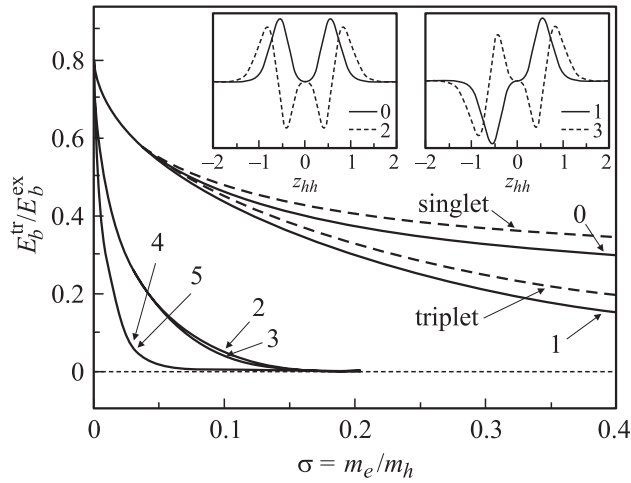
$$\hat{H}_{ad} = -\frac{\sigma}{\sigma + 1} \frac{\partial^2}{\partial z_{hh}^2} + V_{ad}(z_{hh}, a). \quad (20)$$

Уравнения (19), (20) — одномерные и решаются методом конечных разностей. Шаг сетки и границы интегрирования выбирались из условия сходимости алгоритма.

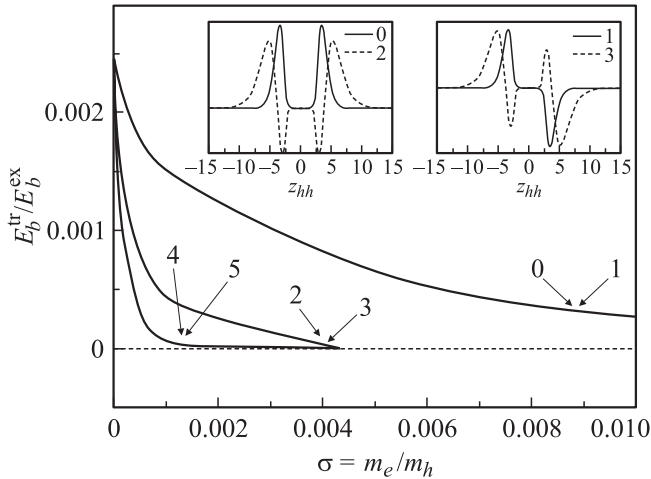
Рассмотрим потенциал  $V_{ad}^0(z_{hh}, a)$ , представляющий собой энергию основного состояния гамильтониана (19).



**Рис. 5.** Зависимости адиабатических потенциалов  $V_{ad}^0$  (a) и  $V_{ad}^1$  (b) от относительной координаты дырок  $z_{hh}$ . Эффективный радиус квантовой нити равен  $a = e^{-1} a_B$  (что соответствует  $\gamma = 1$ ); дырка бесконечно тяжелая,  $\sigma = m_e/m_h = 0$ .



**Рис. 6.** Зависимости энергий связи 6 нижних состояний в потенциале  $V_{ad}^0$  от отношения масс электрона и дырки  $\sigma$  для  $\gamma = 1$ . Штриховые кривые — зависимости для синглетного и триплетного состояний  $X^+$ -триона, приведенные в разд. 4. На вставках — ненормированные волновые функции нижних 4 состояний.



**Рис. 7.** Зависимости энергий связи 6 нижних состояний в потенциале  $V_{ad}^1$  от отношения масс электрона и дырки  $\sigma$ , вычисленные при  $\gamma = 1$ . На вставках — ненормированные волновые функции нижних 4 состояний.

Основное состояние дырок в нем соответствует рассмотренному выше синглетному состоянию  $X^+$ -триона, а первое возбужденное — триплетному. Зависимость потенциала  $V_{ad}^0$  от координаты  $z_{hh}$  для случая бесконечно тяжелой дырки ( $\sigma = 0$ ) показана на рис. 5, *a*. Видно, что потенциал  $V_{ad}^0$  имеет два симметричных минимума вследствие симметрии задачи относительно перестановки дырок. При  $z_{hh} = 0$  он имеет максимум из-за кулоновского отталкивания между дырками. Если  $z_{hh} \rightarrow \infty$ , то  $V_{ad}^0 \rightarrow 0$ . Локализованные в рассматриваемом потенциале состояния дырок с четными номерами (имеющими вид  $2k$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ ) имеют симметричную дырочную

волновую функцию, а с нечетными номерами ( $2k + 1$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ ) — антисимметричную.

На рис. 6 показаны зависимости энергии связи первых 6 состояний (0–5) в потенциале  $V_{ad}^0$  от отношения эффективных масс электрона и дырки  $\sigma$ , вычисленные при  $\gamma = 1$ . Штриховые линии соответствуют энергиям связи синглетного и триплетного состояний, приведенным в разд. 4. Видно, что вблизи  $\sigma = 0$  энергии связи убывают как  $\sqrt{\sigma}$ , причем пары уровней с номерами  $2k$  и  $2k + 1$  в области малых значений  $\sigma$  приближаются друг к другу. При малых значениях  $\sigma$  адиабатический потенциал можно хорошо аппроксимировать параболическим и уравнение Шредингера с гамильтонианом (20), очевидно, сводится к уравнению для гармонического осциллятора. Энергетический спектр при малых значениях  $\sigma$ , вычисленный для  $\gamma = 1$ , имеет вид

$$E_b^{tr} \approx [0.824 - 2.814(k + 1/2)\sqrt{\sigma}]E_b^{ex} \quad (21)$$

и не зависит от четности уровня. Сравнение с результатами вариационного расчета (представленными на рисунке штриховой линией) показывает, что при  $\sigma < 0.2$  погрешность адиабатического приближения не превышает 10%.

Анализ уравнения (19) показывает, что связанными состояниями обладает не только адиабатический потенциал  $V_{ad}^0$ , соответствующий основному состоянию, но и потенциал  $V_{ad}^1$ , представляющий первое возбужденное состояние электронного гамильтониана (19), состояния триона в котором аналогичны антисвязывающим состояниям молекулярных ионов. Зависимость  $V_{ad}^1(z_{hh}, a)$  показана на рис. 5, *b*. Однако потенциал  $V_{ad}^1$  имеет гораздо менее выраженные минимумы по сравнению с  $V_{ad}^0$ . Поэтому энергии связи локализованных состояний в нем будут значительно меньше и убывать с ростом  $\sigma$  они будут быстрее, чем энергии связи соответствующих состояний в потенциале  $V_{ad}^0$ . Энергии связи первых 6 состояний, рассчитанные для адиабатического потенциала  $V_{ad}^1$  при  $\gamma = 1$ , показаны на рис. 7. Каждая кривая соответствует паре уровней с номерами  $2k$  и  $2k + 1$ ,  $k = 0, 1, 2$ , которые на рисунке неразличимы.

## 6. Заключение

В работе изучены экситонные и трионные состояния в квазиодномерных системах — полупроводниковых квантовых нитях. Предложены физические обоснованные пробные функции, позволяющие вычислить энергию связи основного и первого возбужденного состояний трионов в квантовых нитях. Точность результатов, полученных вариационным методом, проконтролирована сопоставлением вариационного расчета и прямой диагонализации гамильтониана.

Показано, что энергия связи  $X^+$ - и  $X^-$ -трионов определяется двумя параметрами: отношением масс носителей  $\sigma = m_e/m_h$  и параметром  $\gamma = \ln(a_B/a)$ , непосредственно связанным с эффективной шириной квантовой

нити  $a$ . Установлено, что энергия связи таких комплексов логарифмически расходится при уменьшении радиуса нити. Получены асимптотики энергии связи экситона и триона в предельном случае  $\gamma = \ln(a_B/a) \gg 1$ .

Показано, что зависимость отношения энергии связи трионов к энергии связи экситона от параметра  $\gamma$  при небольших значениях последнего можно с хорошей точностью аппроксимировать линейным законом. Установлен существенно разный характер зависимости энергии связи  $X^+$ - и  $X^-$ -трионов от отношения масс электрона и дырки при фиксированном радиусе квантовой нити. Показано, что при изменении  $\sigma$  от 0 до 1 энергия связи  $X^-$ -триона меняется слабее, чем в идеальной двумерной квантовой яме, а  $X^+$ -триона, напротив, сильнее.

В рамках адиабатического приближения найдены зависимости энергии связи основного и серии возбужденных состояний  $X^+$ -триона. Показано, что синглетное и триплетное состояния  $X^+$ -триона с приемлемой точностью (погрешность в вычислении энергии связи не более 10%) описываются в рамках адиабатического приближения при  $m_e/m_h < 0.2$ .

Работа поддержана грантом РФФИ № 08-02-01337-а, Федеральной программой поддержки Ведущих научных школ и грантом SCOPES-110986.

[20] P.A. Сергеев, P.A. Сурис. ФТП, **43** (14), 714 (2001).

[21] A. Thilagam. Phys. Rev. B, **55**, 7804 (1997).

Редактор Л.В. Шаронова

## Binding energy of the exciton and $X^+$ , $X^-$ -trions in one-dimensional systems

M.A. Semina, R.A. Sergeev, R.A. Suris

Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Exciton and trion states in semiconductor quantum wells are studied by means of the variational approach. Simple trial functions, providing adequate accuracy within wide range of the wire radii at arbitrary ratio between effective masses of the carriers, are suggested. Accuracy of the variational results is verified using the numerical diagonalization of the exciton and  $X^+$ ,  $X^-$ -trions Hamiltonians. Analytical asymptotics of the exciton and trions binding energies in thin quantum wires are obtained. The structure of the  $X^+$ -trion excited states are analyzed within the framework of the adiabatic approximation.

## Список литературы

- [1] B. Stebe, C. Comte. Phys. Rev. B, **15**, 8, 3967 (1977).
- [2] R. Schilling, D.C. Mattis. Phys. Rev. Lett., **49**, 11, 808 (1982).
- [3] B. Stebe, A. Ainane. Superlatt. Microstruct., **5** (4), 545 (1989).
- [4] K. Kheng, R.T. Cox, M.Y. d'Aubigné, F. Bassani, K. Saminadayar, S. Tatarenko. Phys. Rev. Lett., **71** (11), 1752 (1993).
- [5] A. Wojs, P. Hawrylak. Phys. Rev. B, **51**, 10880 (1995).
- [6] A. Hartmann, Y. Ducommun, E. Kapon, U. Hohenester, E. Molinari. Phys. Rev. Lett., **84**, 5648 (2000).
- [7] T. Otterburg, D.Y. Oberli, M.-A. Dupertuis, N. Moret, E. Pelucchi, B. Dwir, K. Leifer, E. Kapon. Phys. Rev. B, **71**, 033 301 (2005).
- [8] A. Esser, R. Zimmermann, E. Runge. Phys. Status Solidi B, **227**, 317 (2001).
- [9] B. Szafran, T. Chwiej, F.M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski. Phys. Rev. B, **76** 235 305 (2005).
- [10] R.J. Elliott, R. Loudon. J. Phys. Chem. Sol., **15**, 196 (1960).
- [11] J. Javanainen, J.H. Eberly, Q. Su. Phys. Rev. A, **38**, 3430 (1988).
- [12] Q. Su, J.H. Eberly, J. Javanainen. Phys. Rev. Lett., **64**, 862 (1990).
- [13] F.C. Zang, S. Das Sarma. Phys. Rev. B, **33**, 2903 (1986).
- [14] K. Jauregui, W. Hausler, B. Kramer. Europhys. Lett., **24**, 581 (1993).
- [15] H.J. Schulz. Phys. Rev. Lett., **71**, 1864 (1993).
- [16] M. Fabrizio, A.O. Gogolin, S. Scheidl. Phys. Rev. Lett., **72**, 2235 (1994).
- [17] R. Egger, H. Grabert. Phys. Rev. B, **55**, 9929 (1997).
- [18] R. Loudon. Amer. J. Phys., **44**, 1064 (1976).
- [19] S. Bednarek, B. Szafran, T. Chwiej, J. Adamowski. Phys. Rev. B, **68**, 045 328 (2003).