

Простейшие электронно-дырочные комплексы, локализованные на продольных флуктуациях квантовых проволок

© М.А. Семина[¶], Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис

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

(Получена 3 марта 2009 г. Принята к печати 11 марта 2009 г.)

Вариационным методом исследовано влияние на состояния электронно-дырочных комплексов в полупроводниковых квантовых проволоках их дополнительной локализации вдоль оси структуры. Предложены простые пробные функции с небольшим числом физически обоснованных подгоночных параметров, обеспечивающие хорошую точность вычисления энергий связи основных состояний комплексов в широком диапазоне изменения параметров системы. Общий вид предложенных пробных функций не зависит от конкретной формы потенциала неоднородности. Применимость метода проиллюстрирована на примерах экситона, X^+ - и X^- -трионов, локализованных на неоднородности, описываемой параболическими потенциалами. Произведена оценка погрешности разработанного метода для описания локализации комплексов на потенциале неоднородности произвольной формы. Точность вариационных расчетов энергии связи локализованного экситона оценена путем сопоставления результатов с полученными с помощью непосредственной численной диагонализации гамильтониана.

PACS: 73.21.Nb, 71.35.Pq

1. Введение

Большой интерес представляет исследование экситонов (электронно-дырочных пар) и трионов (положительно и отрицательно заряженных трехчастичных комплексов) в полупроводниковых квантовых проволоках, поскольку именно эти комплексы определяют оптические свойства структур вблизи края фундаментального поглощения [1–6]. Важным следствием понижения размерности системы является значительное увеличение эффектов кулоновского взаимодействия между носителями заряда. Благодаря этому в структурах с квантовыми проволоками энергии связи электронно-дырочных комплексов значительно возрастают по сравнению с объемными материалами [1,3,4,7–9], что приводит к возникновению благоприятных условий для экспериментальных наблюдений многочастичных комплексов.

Принципиальной особенностью теоретического описания электронно-дырочных комплексов в структурах с квантовыми проволоками является отсутствие одномерного предела: при стремлении радиуса системы к нулю характерная энергия кулоновского взаимодействия между носителями заряда логарифмически расходится [3,10]. Существуют всего несколько теоретических работ [3–6], посвященных изучению трионов в квазиодномерных системах. В работе [3] при помощи простого и наглядного вариационного метода рассмотрен предельный случай квантовых проволок очень малого радиуса. Напротив, в работах [4–6], где исследовались квантовые проволоки с радиусами, при которых логарифмическая асимптотика не работает, использованы методы, позволяющие вычислить энергии и волновые функции комплексов с очень высокой точностью. Однако громоздкость подобных методов затрудняет анализ зависимости энергии

связи и строения экситонов и трионов от параметров структуры в широком диапазоне изменения последних. В недавней работе [11] нами было показано, что результаты работ [4–6] могут быть неплохо описаны в рамках простейшего вариационного метода, в котором основное состояние экситона описывается однопараметрической волновой функцией, а X^+ - и X^- -трионов — с помощью пробных функций с четырьмя параметрами.

Сравнение экспериментальных данных и результатов теоретических расчетов показывает, что измеряемые величины энергии связи трионов в квантовых проволоках могут значительно превышать значения, рассчитанные теоретически для идеальных структур [1]. Это связано с локализацией комплексов на неизбежных флуктуациях поперечного размера проволок, подобно тому как локализуются комплексы на флуктуациях интерфейсов квантовых ям [12–16]. Представляется разумным описание этого эффекта аналогично тому, как это было сделано в работе [17], т. е. с применением вариационных методов с минимальным возможным числом параметров. Эту цель и преследует данная работа.

Здесь приводятся обобщение метода, разработанного в работе [17], на случай квазиодномерных систем и построение для описания локализованных электронно-дырочных комплексов простых пробных функций с небольшим числом подгоночных параметров, имеющих ясный физический смысл. Это позволит, пусть и с меньшей точностью, но зато в широком диапазоне изменения параметров системы и с небольшими вычислительными затратами выполнить анализ зависимости строения комплексов от параметров структуры, а также открывает возможность решения обратной задачи об оценке параметров неоднородности структуры по величинам энергий связи.

[¶] E-mail: msemina@gmail.com

2. Вариационный метод и модель неоднородности

В данном разделе рассмотрен общий случай электронно-дырочного комплекса, локализованного вдоль оси квантовой проволоки на неоднородности структуры. Выделены предельные случаи, в которых его волновую функцию можно упростить. Предложен общий вид пробной функции, плавно переходящей между формами, соответствующими выделенным предельным случаям.

А. Гамильтониан системы и предельные случаи

Пусть характерные величины энергий размерного квантования электрона и дырки в направлении, перпендикулярном оси квантовой проволоки E_{\perp} , существенно превышают характерную энергию кулоновского взаимодействия между частицами E_C (это приближение будет использовано везде в дальнейшем):

$$E_{\perp} \gg E_C, \quad (1)$$

где E_{\perp} — энергия размерного квантования носителей в плоскости поперечного сечения квантовой проволоки, E_C — характерная величина кулоновского взаимодействия. Тогда в методе эффективной массы кулоновское взаимодействие локализованных в ней носителей заряда может быть описано при помощи эффективного потенциала вида (см., например, [18–24]):

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

Для большей наглядности в данной работе в качестве единицы длины выбран объемный экситонный борковский радиус $a_B = \hbar^2 \epsilon / \mu e^2$, а в качестве единицы энергии — объемный экситонный Ридберг $Ry = \mu e^4 / 2 \epsilon^2 \hbar^2$. В формуле (2) a — эффективный радиус с бесконечным барьером соотносится с реальным радиусом R как $a = R/2$ (см. [11]).

Кулоновское отталкивание носителей заряда одного знака описывается эффективным потенциалом, подобным (2), однако эффективный радиус проволоки может отличаться от стоящего в (2) вследствие неравенства радиуса локализации электронов и дырок в поперечном направлении. Этим эффектом мы пренебрегаем и в дальнейшем будем считать, что отталкивание между одинаковыми носителями описывается потенциалом

$$\hat{V}'_{\text{eff}}(z, a) = -\hat{V}_{\text{eff}}(z, a) = \frac{2}{\sqrt{z^2 + a^2}}, \quad (3)$$

отличающимися от потенциала притяжения (2) только знаком. Известно, что характерная величина кулоновского взаимодействия между носителями определяется логарифмом эффективного радиуса квантовой проволоки. Иными словами, эта зависимость является достаточно слабой, и, следовательно, приближение (3) не вносит существенной погрешности.

Неоднородность квантовой проволоки по аналогии с [17] будет характеризоваться независимыми одночастичными потенциалами притяжения, действующими вдоль оси проволоки на электроны $U_e(z_e)$ и дырки $U_h(z_h)$. Форма потенциалов $U_e(z_e)$ и $U_h(z_h)$ определяется формой неоднородности и может варьироваться в широких пределах.

Безразмерный гамильтониан электронно-дырочного комплекса, состоящего из N_e электронов и N_h дырок ($N_e, N_h = 1, 2$), в такой системе имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_h + \hat{V}_C + \hat{V}_e + \hat{V}_h. \quad (4)$$

Здесь \hat{T}_e и \hat{T}_h — операторы кинетической энергии электронной и дырочной подсистем; \hat{V}_C — оператор полного кулоновского взаимодействия между носителями, описываемого при помощи эффективного потенциала (2); \hat{V}_e и \hat{V}_h — потенциалы взаимодействия электронной и дырочной подсистем с дефектом:

$$\hat{V}_e(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}}) = \sum_{i=1}^{N_e} U_e(z_{e_i}), \quad (5)$$

$$\hat{V}_h(z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}}) = \sum_{j=1}^{N_h} U_h(z_{h_j}).$$

Согласно общему методу, предложенному в [17], введем следующие величины, характеризующие электронно-дырочный комплекс: ΔE_e и ΔE_h — характерные расстояния между уровнями квантования невзаимодействующих электронов и дырок в одномерных потенциалах $U_e(z_e)$ и $U_h(z_h)$ соответственно.

Соотношения между величинами E_C , ΔE_e и ΔE_h обозначим как

$$W_e = \frac{\Delta E_e}{E_C}, \quad (6)$$

$$W_h = \frac{\Delta E_h}{E_C}.$$

В рассматриваемой системе, как и в квантовой яме с неоднородностью интерфейса, есть всего два качественно различных предельных случая, у которых волновая функция электронно-дырочного комплекса может быть упрощена [17].

1. Предельный случай „слабого“ потенциала неоднородности. Выполнено условие

$$W_e, W_h \gg 1.$$

Тогда переменные, описывающие движение центра масс комплекса и относительное движение составляющих его носителей, разделяются. В этом случае волновая функция может быть представлена в следующем виде:

$$\Psi(Z, z_1, \dots, z_{N_e+N_h-1}) = \Psi^{\text{CM.}}(Z) \Psi^{\text{int}}(z_1, \dots, z_{N_e+N_h-1}), \quad (7)$$

где Z — координата центра масс системы, z_i ($i = 1, \dots, N_e + N_h - 1$) — относительные координаты частиц в комплексе.

Функция $\Psi^{C.M.}(Z)$, описывающая движение центра масс комплекса, удовлетворяет уравнению Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H}_{C.M.} = \hat{T}_{C.M.} + \hat{V}_e(Z) + \hat{V}_h(Z), \quad (8)$$

где $\hat{T}_{C.M.}$ — оператор кинетической энергии центра масс комплекса. Потенциалы $\hat{V}_e(Z)$ и $\hat{V}_h(Z)$ есть потенциалы (5), взятые при $z_{e_i}, z_{h_j} \equiv Z$, так что $\hat{V}_e(Z) = N_e U_e(Z)$ и $\hat{V}_h(Z) = N_h U_h(Z)$ [25]. Волновая функция относительного движения носителей в свободном одномерном комплексе $\Psi^{int}(z_1, \dots, z_{N_e+N_h-1})$ есть решение уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H}_{int} = \hat{T}_{int} + \hat{V}_C(z_1, \dots, z_{N_e+N_h-1}), \quad (9)$$

где \hat{T}_{int} — оператор кинетической энергии относительного движения носителей.

2. Предельный случай „сильного“ потенциала неоднородности. Выполнено условие

$$W_e \gg 1 \quad \text{или} \quad W_h \gg 1.$$

В этом случае можно разделить координаты электронной и дырочной подсистем комплекса. Тогда его волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} &\Psi(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}}, z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}}) \\ &= \Phi^e(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}}) \Phi^h(z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}}). \end{aligned} \quad (10)$$

Функция $\Phi^e(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}})$, описывающая электронную подсистему, в согласии с [17], есть решение уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{H}_{e_i} + \langle \Phi_0^h | \hat{V}_C | \Phi_0^h \rangle, \quad (11)$$

$$\hat{H}_{e_i} = \hat{T}_{e_i} + U_e(z_{e_i}), \quad (12)$$

где Φ_0^h — волновая функция дырочной подсистемы, вычисленная без учета взаимодействия между носителями, а \hat{H}_{e_i} — гамильтониан одиночного электрона в квантовой проволоке с неоднородностью. Функция $\Phi^h(z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}})$ является решением уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H}_h = \sum_{j=1}^{N_h} \hat{H}_{h_j} + \langle \Phi_0^e | \hat{V}_C | \Phi_0^e \rangle, \quad (13)$$

$$\hat{H}_{h_j} = \hat{T}_{h_j} + U_h(z_{h_j}), \quad (14)$$

где Φ_0^e — функция электронной подсистемы, вычисленная без учета взаимодействия между носителями, а \hat{H}_{h_j} — гамильтониан одиночной дырки в квантовой проволоке с неоднородностью.

В. Пробные функции

Сформулируем основные требования к пробным функциям, описывающим структуру электронно-дырочных комплексов при произвольных потенциалах неоднородности. Они должны:

1) обладать минимально возможным числом подгоночных параметров, имеющих прозрачный физический смысл;

2) плавно переходить между формами, соответствующими выделенным предельным случаям;

3) иметь общий вид, не зависящий от конкретной формы эффективных потенциалов неоднородности $U_e(z_e)$ и $U_h(z_h)$.

Таким образом, в качестве пробных функций для электронно-дырочного комплекса, локализованного на неоднородности квантовой проволоки, выбраны следующие функции с одним и четырьмя подгоночными параметрами:

$$\begin{aligned} &\Psi(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}}, z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}}) \\ &= [\Psi^{C.M.}(Z) \Psi^{int}(z_1, \dots, z_{N_e+N_h-1})]^\alpha \\ &\quad \times [\Phi^e(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}}) \Phi^h(z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}})]^{1-\alpha}, \end{aligned} \quad (15)$$

где α — единственный подгоночный параметр, и

$$\begin{aligned} &\Psi(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}}, z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}}) \\ &= [\Psi^{C.M.}(Z)]^{\alpha_R} [\Psi^{int}(z_1, \dots, z_{N_e+N_h-1})]^{\alpha_p} \\ &\quad \times [\Phi^e(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}})]^{\alpha_e} [\Phi^h(z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}})]^{\alpha_h}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $\alpha_R, \alpha_p, \alpha_e, \alpha_h$ — подгоночные параметры.

Единственный параметр α пробной функции (15) имеет смысл меры корреляции электронной и дырочной подсистем комплекса между собой. Предельному случаю „слабого“ потенциала неоднородности соответствует значение $\alpha = 1$, при котором функция (15) принимает вид (7). Значение $\alpha = 0$ приводит пробную функцию к виду, отвечающему противоположному предельному случаю „сильного“ потенциала неоднородности (10).

Подгоночные параметры α_e и α_h в пробной функции (16) характеризуют независимое квантование подсистем электронов и дырок, а α_p и α_R — электронно-дырочный комплекс как целое. В предельных случаях „слабого“ и „сильного“ потенциалов неоднородности пробная функция (16) принимает форму (7) при $\alpha_{R,p} = 1$, $\alpha_{e,h} = 0$ и (10) при $\alpha_{R,p} = 0$, $\alpha_{e,h} = 1$. Предложенные пробные функции плавно переходят между формами, соответствующими предельным случаям при изменении соответствующих подгоночных параметров между 0 и 1.

Отметим, что функции $\Psi^{C.M.}(Z)$, $\Psi^{int}(z_1, \dots, z_{N_e+N_h-1})$, $\Phi^e(z_{e_1}, \dots, z_{e_{N_e}})$ и $\Phi^h(z_{h_1}, \dots, z_{h_{N_h}})$ являются решением независимых друг от друга уравнений Шредингера для систем с меньшим, чем исходная, числом частиц,

поэтому их определение требует заметно меньших вычислительных затрат. Обратим внимание на то, что здесь рассматриваются комплексы, содержащие не более двух одинаковых частиц, основным состоянием которых является синглетная конфигурация спинов идентичных носителей. Поэтому соответствующие координатные функции должны быть симметризованы. Так как сомножители, входящие в пробные функции, вычисляются независимо друг от друга, симметризация производится отдельно для каждого из них.

С. Потенциал неоднородности

Хотя вид пробных функций, предложенных выше (15), (16), не зависит от конкретной формы потенциала неоднородности, расчеты энергий связи электронно-дырочных комплексов будут проводиться для частного случая параболических потенциалов

$$U_e = \frac{1}{4} (1 + \sigma) W_e^2 E_{ex}^2 z_e^2, \quad (17)$$

$$U_h = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{\sigma} \right) W_h^2 E_{ex}^2 z_h^2, \quad (18)$$

где $W_{e,h}$ — параметры, введенные в (6), σ — отношение эффективных масс электрона и дырки. В качестве $E_{e,h}$ здесь выбраны расстояния между уровнями квантования изолированных электронов и дырок в потенциалах неоднородности, в качестве $E_c = E_{ex}$ — энергия связи свободного экситона в квантовой проволоке соответствующего радиуса.

Такой выбор эффективных потенциалов неоднородности вызван несколькими факторами. Во-первых, произвольный потенциал, обусловленный неоднородностью системы, вблизи его минимума можно приблизить параболическим. Во-вторых, установлено, что флуктуации ширины квантовых ям и квантовые точки хорошо описываются параболическими потенциалами [26,27], и поэтому является разумным обобщить эту модель и на квазиодномерные системы. Наконец, как было показано в [17], потенциал параболической формы является промежуточным с точки зрения точности вариационных расчетов: с одной стороны, в потенциалах вида $|z|^\delta$ при $\delta < 2$ уровни сгущаются с увеличением энергии, и волновая функция либо состоит из основного состояния частиц, либо сразу является пакетом из большого числа возбужденных состояний. К такому классу потенциалов относится, например, треугольный ($\delta = 1$). Именно эту ситуацию эффективно описывают функции (15), (16), и можно ожидать, что погрешность при их использовании для такого класса потенциалов будет меньше, чем для параболического. С другой стороны при $\delta > 2$ уровни разрежаются с увеличением энергии и погрешность расчета с пробными функциями (15), (16) возрастает по сравнению со случаем параболического потенциала. К такому классу потенциалов можно отнести прямоугольную квантовую яму с бесконечным барьером (со-

ответствует $\delta \rightarrow \infty$). Параболический потенциал демонстрирует промежуточную величину погрешности.

Описанная выше модель неоднородности применима, если характерные энергии квантования электронов и дырок в потенциале неоднородности $\Delta E_e = W_e E_{ex}$ и $\Delta E_h = W_h E_{ex}$ меньше энергий размерного квантования носителей в поперечном сечении квантовой проволоки, которые, например, для электронов E_e^\perp и дырок E_h^\perp в цилиндрической квантовой проволоке с бесконечным барьером и радиусом $R = 2a$ оцениваются как

$$E_e^\perp \approx \frac{1}{\sigma + 1} \frac{2.88}{a^2}, \quad E_h^\perp \approx \frac{\sigma}{\sigma + 1} \frac{2.88}{a^2}.$$

Таким образом, получаем следующие условия для применимости метода:

$$W_e < \frac{1}{\sigma + 1} \frac{2.88}{a^2 E_{ex}}, \quad W_h < \frac{\sigma}{\sigma + 1} \frac{2.88}{a^2 E_{ex}}. \quad (19)$$

Если условие (19) не выполнено, то описывать кулоновское взаимодействие при помощи эффективного потенциала (2) нельзя. Действительно, в этом случае волновая функция экситона вдоль оси квантовой проволоки сосредоточена в области $z_{e,h} < 1/a$, в которой эффективный потенциал (2) дает наибольшее отличие от кулоновского потенциала, усредненного с волновыми функциями поперечного движения носителей. Предел, обратный (19), соответствует двумерному экситону, локализованному в плоскости, и соответствует пределу „сильного“ квантования, рассмотренному в [17].

Далее приведены результаты расчета энергий связи экситона, X^+ - и X^- -трионов, локализованных в параболическом потенциале неоднородности.

3. Экситон, локализованный на неоднородности квантовой проволоки

В данном разделе рассмотрен частный случай экситона, локализованного на неоднородности квантовой проволоки параболической формы.

А. Пробные функции

Гамильтониан электронно-дырочной пары, локализованной на неоднородности квантовой проволоки, в согласии с уравнениями (4), (5) имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma + 1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\sigma}{\sigma + 1} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + \hat{V}_{\text{eff}}(z_e - z_h, a) + U_e(z_e) + U_h(z_h). \quad (20)$$

Волновые функции, описывающие локализацию центра масс экситона $\Psi^{\text{CM}}(Z)$, относительное движение электрона и дырки $\Psi^{\text{int}}(z)$, а также квантование носителей по отдельности $\Phi^e(z_e)$ и $\Phi^h(z_h)$, принимают для

квазиодномерного экситона, локализованного в параболическом потенциале неоднородности, следующий вид:

$$\Psi^{\text{C.M.}}(Z) = \exp \left[-\frac{(1+\sigma)^2 E_{ex}}{4\sigma} \sqrt{W_e^2 + W_h^2 Z^2} \right], \quad (21)$$

где $Z = (\sigma z_e + z_h)/(1+\sigma)$ — координата центра масс экситона.

Функция относительного движения носителей $\Psi^{\text{int}}(z)$ для экситона в квантовой проволоке в аналитическом виде не записывается, в отличие от соответствующей функции для двумерного экситона. Поэтому она выбирается как результат минимизации энергии соответствующего гамильтониана с пробной функцией в виде

$$\Psi^{\text{int}}(z) = \exp(-A_\rho z) \quad (22)$$

(здесь $z = z_e - z_h$) с единственным подгоночным параметром A_ρ . Это позволяет получить функцию $\Psi^{\text{int}}(z)$ в аналитической форме. В [11] показано, что такая функция (22) обеспечивает приемлемую (не хуже 6%) точность в актуальном диапазоне изменения радиусов проволоки.

Волновая функция $\Phi^e(z_e)$, описывающая независимое квантование электрона, есть решение следующего уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + U_e(z_e) + \langle \Psi_0^h(z_h) | \hat{V}_{\text{eff}}(z_e - z_h, a) | \Psi_0^h(z_h) \rangle - E_e \right] \Phi^e(z_e) = 0, \quad (23)$$

где волновая функция

$$\Psi_0^h(z_h) = \exp \left[-\frac{1}{4\sigma} (\sigma+1) W_h E_{ex} z_h^2 \right] \quad (24)$$

есть функция основного состояния одиночной дырки в потенциале неоднородности $U_h(z_h)$. Аналогичным образом волновая функция $\Phi^h(z_h)$, описывающая квантование дырки, является решением следующего уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + U_h(z_h) + \langle \Psi_0^e(z_e) | \hat{V}_{\text{eff}}(z_e - z_h, a) | \Psi_0^e(z_e) \rangle - E_h \right] \Phi^h(z_h) = 0, \quad (25)$$

где

$$\Psi_0^e(z_e) = \exp \left[-\frac{1}{4} (\sigma+1) W_e E_{ex} z_e^2 \right] \quad (26)$$

есть волновая функция основного состояния электрона в потенциале $U_e(z_e)$.

Волновые функции $\Phi^e(z_e)$ и $\Phi^h(z_h)$ вычислялись вариационным методом с пробными функциями, обладающими двумя подгоночными параметрами:

$$\Phi^e(z_e) = \exp(-A_e |z_e| - B_e z_e^2), \quad (27)$$

$$\Phi^h(z_h) = \exp(-A_h |z_h| - B_h z_h^2), \quad (28)$$

где $A_{e,h}$, $B_{e,h}$ — подгоночные параметры. Параметры $A_{e,h}$ описывают локализацию носителей за счет кулоновского

взаимодействия с носителями другого типа, а параметры $B_{e,h}$ — за счет взаимодействия с потенциалом неоднородности.

Для расчета энергии связи экситона, локализованного на неоднородности квантовой проволоки, используется пробная функция с четырьмя параметрами (16), которая для экситона принимает следующий вид:

$$\Psi(z_e, z_h) = [\Psi^{\text{C.M.}}(Z)]^{\alpha_r} [\Psi^{\text{int}}(z_0)]^{\alpha_p} [\Phi^e(z_e)]^{\alpha_e} [\Phi^h(z_h)]^{\alpha_j}. \quad (29)$$

Серия зависимостей энергии связи экситона $E_b^{\text{ex}}(W_h)$, полученных при фиксированных значениях параметра W_e путем расчета с функцией (29), представлена

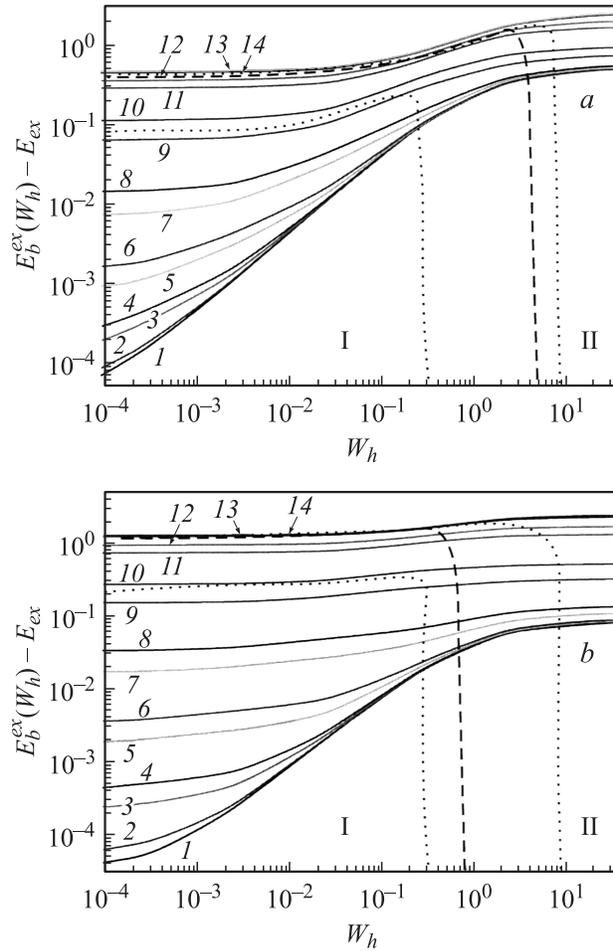


Рис. 1. Зависимости энергии связи экситона $E_b(W_h)$ для различных значений W_e , вычисленные при $\gamma = 1$. За точку отсчета выбрана энергия связи свободного одномерного экситона E_{ex} . Рисунки *a* и *b* соответствуют различным значениям отношения масс электрона и дырки: *a* — $\sigma = 1$, *b* — $\sigma = 0.1$. Кривые 1–14 соответствуют W_e : 1 — $1.7 \cdot 10^{-5}$, 2 — $3.4 \cdot 10^{-5}$, 3 — $1.7 \cdot 10^{-4}$, 4 — $3.4 \cdot 10^{-4}$, 5 — $1.7 \cdot 10^{-3}$, 6 — $3.4 \cdot 10^{-3}$, 7 — $1.7 \cdot 10^{-2}$, 8 — $3.4 \cdot 10^{-2}$, 9 — $1.7 \cdot 10^{-1}$, 10 — $3.4 \cdot 10^{-1}$, 11 — 1.7, 12 — 3.4, 13 — 17, 14 — 34. Штриховой кривой показана граница применимости использованного метода. Области, в которых реализуются предельные случаи „слабого“ и „сильного“ потенциала неоднородности, обозначены римскими цифрами I и II, их границы — пунктирной линией.

на рис. 1, *a* и *b* для отношений масс $\sigma = 1$ и 0.1 соответственно. Такие значения отношения масс были выбраны по следующим причинам: $\sigma = 1$ соответствует равенству масс электрона и дырки $m_e = m_h$, что облегчает проверку результатов расчета, а $\sigma = 0.1$ лежит в области значений, соответствующей реальным полупроводниковым структурам, при которых также заметна разница в энергиях связи между X^+ - и X^- -трионами. Это значение меньше, чем $\sigma = 0.3$, при котором были сделаны расчеты для двумерных локализованных комплексов, так как в одномерном случае энергии связи трионов слабее зависят от отношения масс в актуальном диапазоне его изменения. Все вычисления производились при $\gamma = \ln(a_B/a) = 1$. Штриховой линией показана граница применимости использованного метода.

При любых значениях параметров W_e и W_h энергия связи экситона E_b^{ex} превышает энергию связи свободного экситона, которая при выбранном радиусе квантовой проволоки имеет значение $E_{ex} = 2.94$ (это значение получено вариационным методом в [11]). Это, так же как и в двумерном случае, объясняется увеличением эффективности кулоновского притяжения между электроном и дыркой при росте величин W_e и W_h . Поэтому для наглядности в качестве точки отсчета энергии на графиках выбрана энергия связи свободного одномерного экситона.

В предельном случае „слабого“ потенциала неоднородности увеличение энергии связи экситона по сравнению с проволокой без неоднородности можно представить как

$$E_b^{ex} - E_{ex} \approx \frac{E_{ex}}{2} \left[W_e + W_h - \frac{\sqrt{W_e^2 \sigma + W_h}}{\sqrt{\sigma + 1}} \right]. \quad (30)$$

Здесь потенциал неоднородности не меняет волновую функцию относительного движения электрона и дырки, и увеличение энергии связи экситона происходит за счет более эффективной по сравнению с локализацией с отдельных носителей локализации центра масс экситона. Область применимости асимптотики (30) обозначена на рис. 1 римской цифрой I, а ее граница показана пунктирной кривой. Римскими цифрами II и III обозначены области реализации предельного случая „сильного“ потенциала неоднородности и переходная область.

В пределе $W_{e,h} \gg 1$ в рамках использованной модели имеем

$$E_b^{ex} \approx \hat{V}_{\text{eff}}(0, a) = \frac{2}{a}, \quad (31)$$

так как электрон и дырка оказываются настолько сильно локализованными, что их координаты вдоль оси квантовой проволоки практически совпадают. В пределе $W_h \gg 1$, $W_e \rightarrow 0$ и $W_e \gg 1$, $W_h \rightarrow 0$ аналитические выражения для соответствующих асимптотик крайне громоздки и здесь не приводятся. Тем не менее они дают хорошее совпадение с результатом вариационного расчета.

Необходимо обратить внимание на то, что область реализации предельного случая 2 (предел „сильного“

потенциала неоднородности) не входит в область применимости эффективного потенциала (2), поэтому нахождение асимптотик важно лишь для контроля правильности выполненного расчета. Точный расчет энергии связи в пределе $W_{e,h} \gg 1$ (диагонализация гамильтониана электронно-дырочной пары в цилиндрически симметричном квантовом диске нулевой высоты) дает

$$E_b^{ex} \approx \frac{2.6}{a}, \quad (32)$$

что отличается от значения (31) на 23%. Это объясняется тем, что эффективный потенциал (2) в области $|z| \ll a$ имеет меньшие значения нежели потенциал, являющийся результатом усреднения трехмерного кулоновского потенциала с волновыми функциями размерного квантования изолированных электрона и дырки в поперечном сечении квантовой проволоки. Достаточно высокая точность предложенного метода в области значения параметров, выходящей за границы его применимости, свидетельствует об оптимальном выборе эффективного потенциала (2).

Сравним результаты вариационного расчета энергии связи экситона в квантовой проволоке с неоднородностью с результатами, представленными в [17] для локализованного двумерного экситона. Из сопоставления выражения (30) и аналогичного ему выражения для двумерного случая можно увидеть, что рост энергии связи экситона вследствие его дополнительной локализации на неоднородности интерфейса в двумерном случае быстрее, чем в одномерном при выполнении условия $E_{ex} \leq 8$ (это соответствует $\gamma \approx 2.48$). При выполнении противоположного условия, $E_{ex} \geq 8$, быстрее растет энергия связи экситона в квантовой проволоке.

Необходимо отметить, что из рис. 1 видно, что значительная часть актуальной области значений параметров W_e и W_h может быть аналитически описана асимптотической формулой (30).

В. Оценка точности вариационного расчета энергии связи экситона

Для оценки точности вычисления энергии связи экситона, локализованного вдоль оси квантовой проволоки на неоднородности структуры, была выполнена диагонализация матрицы гамильтониана экситона (20), вычисленной на следующем неортонормированном базисе:

$$\Psi_i(z, Z) = \exp(-A_i z^2) \exp(-B_i Z^2) \times \exp(-C_i z_e^2) \exp(-D_i z_h^2), \quad i = 1 \dots 400. \quad (33)$$

Здесь координаты электрона z_e и дырки z_h выражаются через координаты центра масс экситона и относительно движения носителей следующим образом:

$$z_e = Z + \frac{1}{\sigma + 1} z, \quad z_h = Z - \frac{1}{\sigma + 1} z.$$

Отметим, что при выборе базиса в виде (33) все элементы матрицы гамильтониана экситона вычисляются в

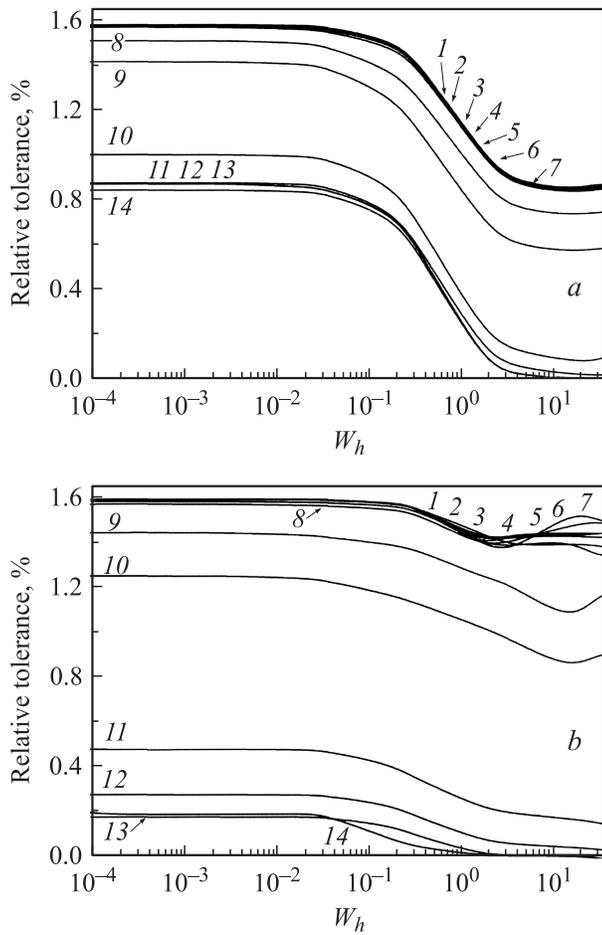


Рис. 2. Зависимости относительной ошибки в вычислении энергии связи экситона $E_b(W_h)$ при помощи пробной функции (29) для различных значений W_e , вычисленные при $\gamma = 1$. Рисунки *a* и *b* соответствуют различным значениям отношения масс электрона и дырки: *a* — $\sigma = 1$, *b* — $\sigma = 0.1$. Кривые 1–14 соответствуют W_e : 1 — $1.7 \cdot 10^{-5}$, 2 — $3.4 \cdot 10^{-5}$, 3 — $1.7 \cdot 10^{-4}$, 4 — $3.4 \cdot 10^{-4}$, 5 — $1.7 \cdot 10^{-3}$, 6 — $3.4 \cdot 10^{-3}$, 7 — $1.7 \cdot 10^{-2}$, 8 — $3.4 \cdot 10^{-2}$, 9 — $1.7 \cdot 10^{-1}$, 10 — $3.4 \cdot 10^{-1}$, 11 — 1.7, 12 — 3.4, 13 — 17, 14 — 34.

аналитической форме и численный расчет применяется только для диагонализации. Энергия экситона минимизируется по параметрам A_i , B_i , C_i , D_i . Для ускорения расчета минимизация выполняется методом статистических испытаний (параметры выбираются случайным образом из некоторой области, границы которой оптимизируются так, чтобы энергия основного состояния была бы минимальной).

На рис. 2 показаны зависимости относительной погрешности расчета энергии связи экситона с пробной функцией (29) от параметра W_h , вычисленные для различных значений параметра W_e . Расчет выполнен для $\gamma = \ln(a_B/a) = 1$ и отношений масс $\sigma = 1$ (рис. 2, *a*) и $\sigma = 0.1$ (рис. 2, *b*). Из рисунка видно, что погрешность вариационного расчета не превышает 2% для произволь-

ных значений параметров W_e и W_h , характеризующих потенциал неоднородности.

Несмотря на то что пробная функция с одним подгоночным параметром также позволяет вычислить энергию связи экситона с хорошей точностью, результаты расчетов с ней здесь не приводятся, так как точности аналогичной пробной функции недостаточно для вычисления энергий связи трионов с разумной погрешностью. Кроме того, из-за небольшого числа переменных расчет энергии связи экситона даже при использовании пробной функции с четырьмя параметрами не требует заметных вычислительных затрат.

4. Энергия связи X^+ - и X^- -трионов, локализованных на неоднородности квантовой проволоки

В данном разделе изучается влияние дополнительной локализации трионов вдоль оси квантовой проволоки на потенциале неоднородности на энергии их связи.

А. Пробные функции

Рассмотрим сначала X^+ -трион в квантовой проволоке с неоднородностью. Его безразмерный гамильтониан в такой системе имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}^+ = & -\frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h_1}^2} - \frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h_2}^2} - \frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \\ & + \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h_1} - z_e, a) + \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h_2} - z_e, a) \\ & - \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h_1} - z_{h_2}, a) + U_h(z_{h_1}) + U_h(z_{h_2}) + U_e(z_e). \end{aligned} \quad (34)$$

Напомним, что потенциал $\hat{V}_{\text{eff}}(z, a) < 0$ является потенциалом притяжения, соответственно $-\hat{V}_{\text{eff}}(z, a) > 0$ является потенциалом отталкивания.

Для нахождения энергии связи основного состояния X^+ -триона используется пробная функция с четырьмя параметрами (16):

$$\begin{aligned} \Psi(z_e, z_{h_1}, z_{h_2}) = & [\Psi^{\text{C.M.}}(Z)]^{\alpha_R} [\Psi^{\text{int}}(z_1, z_2)]^{\alpha_\rho} \\ & \times [\Phi^e(z_e)]^{\alpha_e} [\Phi^h(z_{h_1}, z_{h_2})]^{\alpha_h}, \end{aligned} \quad (35)$$

где α_R , α_ρ , α_e , α_h — подгоночные параметры. Здесь $z_1 = z_{h_1} - z_e$ и $z_2 = z_{h_2} - z_e$ — координаты дырок относительно электрона, $Z = (\sigma z_e + z_{h_1} + z_{h_2})/(\sigma + 2)$ — координата центра масс X^+ -триона.

Функции $\Psi^{\text{C.M.}}(z)$, $\Psi^{\text{int}}(z_1, z_2)$, $\Phi^e(z_e)$ и $\Phi^h(z_{h_1}, z_{h_2})$, входящие в состав пробной функции (35), в рассматриваемом частном случае неоднородности параболической формы выбирались следующим образом.

1. Волновая функция, описывающая квантование центра масс триона в суммарном потенциале $\Psi^{\text{C.M.}}(Z)$:

$$\Psi^{\text{C.M.}}(Z) = \exp \left[-\frac{\sigma+1}{8\sigma} \sqrt{(2+\sigma)(\sigma W_e^2 + 2W_h^2)} E_{ex} Z^2 \right]. \quad (36)$$

Функция (36) является точным решением уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\sigma}{(\sigma+1)(\sigma+2)} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} + U_e(Z) + 2U_h(Z). \quad (37)$$

2. Волновая функция $\Psi^{\text{int}}(z_1, z_2)$, описывающая относительное движение носителей в свободном одномерном трионе, есть решение уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{2}{\sigma+1} \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\partial}{\partial z_2} + \hat{V}_{\text{eff}}(z_1, a) + \hat{V}_{\text{eff}}(z_2, a) - \hat{V}_{\text{eff}}(z_1 - z_2, a). \quad (38)$$

Это уравнение аналитического решения не имеет, поэтому функция $\Psi^{\text{int}}(z_1, z_2)$ искалась с помощью вариационного расчета с пробной функцией

$$\Psi^{\text{int}}(z_1, z_2) = [\exp(-A_1 z_1 - A_2 z_2) + \exp(-A_1 z_2 - A_2 z_1)] \times (1 + A_3 |z_1 - z_2|), \quad (39)$$

где A_1, A_2, A_3 — подгоночные параметры. Параметры A_1 и A_2 имеют смысл обратных радиусов орбит дырок, локализованных на электроне, параметр A_3 учитывает поляризационные эффекты. Такая пробная функция является упрощенным вариантом функции, использованной в [11] для вычисления энергии связи синглетного состояния свободного квазиодномерного триона, и пригодна для вычисления энергии связи свободного одномерного X^+ -триона при $\sigma > 0.1$ и X^- -триона при произвольном отношении масс.

3. Функция $\Phi^e(z_e)$ есть уравнение Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + \tilde{V}_c^e(z_e), \quad (40)$$

где эффективный потенциал для электрона имеет вид

$$\tilde{V}_c^e(z_e) = \langle \Psi_0^h(z_{h_1}) \Psi_0^h(z_{h_2}) | \hat{V}_{\text{eff}}(z_e - z_{h_1}, a) + \hat{V}_{\text{eff}}(z_e - z_{h_2}, a) - \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h_1} - z_{h_2}, a) | \Psi_0^h(z_{h_1}) \Psi_0^h(z_{h_2}) \rangle.$$

Здесь Ψ_0^h — волновая функция основного состояния изолированной дырки в потенциале неоднородности и определяется из решения следующего уравнения Шредингера:

$$\left(-\frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + U_h(z_h - E_h) \right) \Psi_0^h(z_h) = 0. \quad (41)$$

Функция $\Phi^e(z_e)$ также является результатом вариационного расчета, где в качестве пробной взята

$$\Phi^e(z_e) = \exp(-A_{e_1} z_e - A_{e_2} z_e^2). \quad (42)$$

Подгоночный параметр A_{e_1} описывает локализацию электрона за счет притяжения к дыркам, а параметр A_{e_2} — за счет взаимодействия с потенциалом неоднородности.

4. Наконец, волновая функция дырочной подсистемы X^+ -триона $\Phi^h(z_{h_1}, z_{h_2})$ есть решение уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h_1}^2} - \frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h_2}^2} + \tilde{V}_c^e(z_{h_1}, z_{h_2}), \quad (43)$$

где эффективный потенциал для дырок имеет вид

$$\tilde{V}_c^e(z_{h_1}, z_{h_2}) = \langle \Psi_0^e(z_e) | \hat{V}_{\text{eff}}(z_e - z_{h_1}, a) + \hat{V}_{\text{eff}}(z_e - z_{h_2}, a) - \hat{V}_{\text{eff}}(z_{h_1} - z_{h_2}, a) | \Psi_0^e(z_e) \rangle.$$

Здесь Ψ_0^e — волновая функция основного состояния изолированного электрона в потенциале неоднородности. Аналогично (41) функция Ψ_0^e является решением уравнения

$$\left(-\frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + U_e(z_e - E_e) \right) \Psi_0^e(z_e) = 0. \quad (44)$$

Функция дырочной подсистемы $\Phi^h(z_{h_1}, z_{h_2})$ вычисляется вариационным методом, где в качестве пробной взята функция

$$\Phi^h(z_{h_1}, z_{h_2}) = [\exp(-A_{h_1} z_{h_1}^2 - A_{h_2} z_{h_2}^2) + \exp(-A_{h_1} z_{h_2}^2 - A_{h_2} z_{h_1}^2)] (1 + A_{h_3} |z_{h_1} - z_{h_2}|), \quad (45)$$

где $A_{h_1}, A_{h_2}, A_{h_3}$ — подгоночные параметры. Параметры A_{h_1} и A_{h_2} имеют смысл квадратов обратных радиусов орбит дырок, локализованных на потенциале, являющемся суммой потенциалов кулоновского взаимодействия между носителями и эффективного потенциала неоднородности, параметр A_{h_3} учитывает поляризационные эффекты.

Гамильтониан и пробная функция для X^- -триона получаются при замене индексов $e \leftrightarrow h$ и замене отношения масс на обратное $\sigma \rightarrow 1/\sigma$. А именно:

$$\hat{H}^- = -\frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{e_1}^2} - \frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{e_2}^2} - \frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + \hat{V}_{\text{eff}}(z_{e_1} - z_h, a) + \hat{V}_{\text{eff}}(z_{e_2} - z_h, a) - \hat{V}_{\text{eff}}(z_{e_1} - z_{e_2}, a) + U_e(z_{e_1}) + U_e(z_{e_2}) + U_h(z_h) \quad (46)$$

и

$$\Psi(z_{e_1}, z_{e_2}, z_h) = [\Psi^{\text{C.M.}}(Z)]^{\alpha_r} [\Psi^{\text{int}}(z_1, z_2)]^{\alpha_p} \times [\Phi^e(z_{e_1}, z_{e_2})]^{\alpha_e} [\Phi^h(z_{h_1})]^{\alpha_h}, \quad (47)$$

где $z_1 = z_{e_1} - z_h$, $z_2 = z_{e_2} - z_h$, $Z = (\sigma z_{e_1} + \sigma z_{e_2} + z_h)/(2\sigma + 1)$.

В. Результаты численного расчета

Энергиями связи X^- - и X^+ -трионов называют следующие величины:

$$E_b^- = E_{ex} + E_e - E_{tr}^-, \quad (48)$$

$$E_b^+ = E_{ex} + E_h - E_{tr}^+, \quad (49)$$

где E_{ex} — полная энергия экситона, $E_{e,h}$ — энергия одиночного электрона (дырки) в потенциале неоднород-

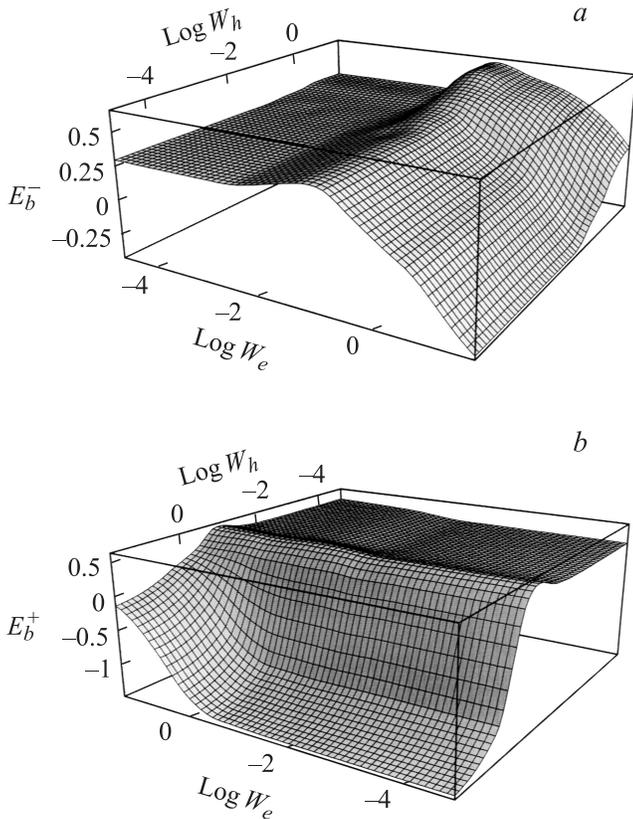


Рис. 3. Зависимости энергий связи: *a* — X^- -трионов и *b* — X^+ -трионов от параметров потенциала неоднородности W_e и W_h , вычисленные для отношения масс $\sigma = 0.1$ и $\gamma = 1$.

ности, E_{tr}^- и E_{tr}^+ — полная энергия X^- - и X^+ -трионов. Таким образом, это есть энергия, необходимая для разделения триона на нейтральный экситон и несвязанный электрон (для X^- -триона) или дырку (для X^+ -триона), иначе говоря, — это энергетическое расстояние между положениями экситонной и трионной линий в спектре люминесценции структуры.

На рис. 3, *a* и *b* показаны зависимости энергий связи X^- - и X^+ -трионов соответственно, расчет сделан для значения $\gamma = 1$ и $\sigma = 0.1$. Подобно приведенным в [17] зависимостям энергий связи двумерных трионов, локализованных на латеральном потенциале, энергии связи X^+ - и X^- -трионов зависят от параметров неоднородности квантовой проволоки немонотонным образом. Это объясняется конкуренцией между притяжением между носителями с зарядами разных знаков и обменным взаимодействием между идентичными частицами, с одной стороны, и кулоновским отталкиванием между носителями одного знака — с другой.

Если $W_{e,h} \rightarrow 0$, то энергии связи X^+ - и X^- -трионов стремятся к значениям энергий связи трионов соответствующих типов в квантовой проволоке в отсутствие неоднородности. При этом, так же как и в двумерном случае, энергия связи X^+ -триона E_b^+ больше энергии связи X^- -триона E_b^- . В предельном случае „слабой“

неоднородности ($W_{e,h} \ll 1$), в котором трион можно рассматривать как единое целое, увеличение энергий связи X^- - и X^+ -трионов за счет дополнительной локализации может быть в первом порядке теории возмущений описано выражениями

$$\Delta E_b^- = \frac{E_{ex}}{2} \left(\sqrt{\frac{\sigma W_e^2 + W_h^2}{\sigma + 1}} + W_e - \sqrt{\frac{2\sigma W_e^2 + W_h^2}{2\sigma + 1}} \right) \quad (50)$$

и

$$\Delta E_b^+ = \frac{E_{ex}}{2} \left(\sqrt{\frac{\sigma W_e^2 + W_h^2}{\sigma + 1}} + W_h - \sqrt{\frac{\sigma W_e^2 + 2W_h^2}{\sigma + 2}} \right) \quad (51)$$

соответственно. Из сравнения выражений (50), (51) и соответствующих выражений для двумерных локализованных трионов можно показать, что так же, как и для экситона, энергия связи трионов растет быстрее за счет дополнительной локализации в двумерном случае, если $E_{ex} \leq 8$ [что соответствует $\gamma = \ln(a_B/a) \approx 2.48$], и в одномерном, если $E_{ex} \geq 8$.

При фиксированном значении параметра W_h с увеличением параметра W_e энергия связи X^- -триона сначала увеличивается вследствие увеличения эффективности обменного взаимодействия между электронами, однако при больших значениях W_e величина E_b^- уменьшается из-за возрастающего кулоновского отталкивания. Энергия связи X^+ -триона при фиксированном W_h зависит от W_e монотонно, так как дополнительная локализация единственного электрона увеличивает эффективность притяжения его к дыркам. При фиксированном W_e энергии связи трионов зависят от W_h противоположным образом. Энергии связи обоих трионов обоих типов могут становиться отрицательными при некоторых значениях параметров потенциала неоднородности, однако система при этом остается локализованной, что является следствием выбора модели неоднородности параболической формы.

В предельных случаях точность результатов вариационного расчета энергий связи трионов с помощью пробных функций (35) и (47) можно оценить как 10% из сопоставления с асимптотиками, полученными по теории возмущений. В промежуточной области точность вариационных результатов может быть несколько ниже.

Приведем оценку изменения энергий связи трионов для реалистичных значений параметров неоднородности. Рассмотрим структуру с квантовой проволокой на основе GaAs, в которой радиус экситона в 2 раза меньше радиуса объемного экситона (соответствует структуре, исследованной в [1]). В нашей модели такой структуре соответствует квантовая проволока с $\gamma = 1.4$. Пусть $W_e = 0.22$, а $W_h = 0.075$, тогда энергии основных состояний электронов и дырок в потенциалах неоднородности будут примерно равны соответствующим энергиям модельных потенциалов из [1]. В такой системе мы получаем увеличение энергий связи экситона, X^- -

и X^+ -трионов приблизительно на 10, 100 и 40% соответственно, что несколько меньше величин, приведенных в работе [1]. Это вызвано грубым выбором формы потенциала в нашей модели. В работе [1] изучались квантовые проволоки с конечным барьером, в которых энергии связи трионов, вычисленные без учета локализации на неоднородности, меньше примерно на 25% соответствующих значений для использованной нами модели. Однако сами величины прироста энергий связи X^- - и X^+ -трионов определяются неоднородностью и поэтому должны быть менее чувствительными к выбору модели для описания квантовой проволоки. Увеличение энергий связи вследствие дополнительной локализации составляет около 2 мэВ и 0.9 мэВ для X^- - и X^+ -трионов и отличается от соответствующих значений из [1] на 25%, что является хорошей точностью для такой оценки.

5. Заключение

В настоящей работе предложены пробные функции с одним и четырьмя подгоночными параметрами, позволяющие вычислить энергию связи электронно-дырочного комплекса, локализованного на неоднородности квантовой проволоки, с хорошей точностью. Общий вид этих функций не зависит от конкретной формы неоднородности. Нами продемонстрирована применимость разработанного метода на примере одномерных экситона, X^+ - и X^- -трионов, локализованных на неоднородности параболической формы, а также произведена оценка точности полученных результатов. Показано, что неоднородности с реалистичными параметрами, локализуящие X^- - и X^+ -трионы, приводят к существенному увеличению энергий связи этих комплексов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 08-02-01337-а и федеральной программой поддержки ведущих научных школ НШ-3415.2008.2.

Список литературы

- [1] 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).
- [2] H. Akiyama, L.N. Pfeiffer, A. Pinczuk, K.W. West, M. Yoshita. *Sol. St. Commun.*, **122**, 169 (2002).
- [3] A.A. Chaplik. *Phys. Low-Dim. Structur.*, **9–10**, 131 (1999).
- [4] E.R.A. Esser, R. Zimmermann. *Phys. Status Solidi B*, **227**, 317 (2001).
- [5] B. Szafran, T. Chwiej, F.M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski. *Phys. Rev. B*, **71**, 235 305 (2005).
- [6] Y. Sidor, B. Partoens, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B*, **77**, 205 413 (2008).
- [7] J.W. Brown, H.N. Spector. *Phys. Rev. B*, **35**, 3009 (1987).
- [8] M.H. Degani, O. Hipólito. *Phys. Rev. B*, **35**, 9345 (1987).
- [9] T. Tsuchiya. *Int. J. Mod. Phys. B*, **15**, 3985 (2001).
- [10] R. Loudon. *Amer. J. Phys.*, **27**, 649 (1959).
- [11] M.A. Семина, P.A. Сергеев, P.A. Сурис. *ФТП*, **42**, 1459 (2008).
- [12] P.M. Petroff. *J. Vac. Sci. Technol.*, **14**, 973 (1977).
- [13] C. Weisbuch, R. Dingle, A.C. Gossard, W. Weigmann. *J. Vac. Sci. Technol.*, **17**, 1128 (1980).
- [14] G. Bastard, C. Delalande, M.H. Meynadier, P.M. Frijlink, M. Voos. *Phys. Rev. B*, **29**, 7042 (1984).
- [15] C. Delalande, M.H. Meynadier, M. Voos. *Phys. Rev. B*, **31**, 2497 (1985).
- [16] A.S. Bracker, E.A. Stinaff, D. Gammon, M.E. Ware, J.G. Tischler, D. Park, D. Gershoni, A.V. Filinov, M. Bonitz, F. Peeters. *Phys. Rev. B*, **72**, 035 332 (2005).
- [17] M.A. Семина, P.A. Сергеев, P.A. Сурис. *ФТП*, **40**, 1373 (2006).
- [18] J. Javanainen, J.H. Eberly, Q. Su. *Phys. Rev. A*, **38**, 3430 (1988).
- [19] Q. Su, J.H. Eberly, J. Javanainen. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 862 (1990).
- [20] F.C. Zhang, S. Das Sarma. *Phys. Rev. B*, **33**, 2903 (1986).
- [21] W.H.K. Jauregui, B. Kramer. *Europhys. Lett.*, **24**, 581 (1993).
- [22] H.J. Schulz. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 1864 (1993).
- [23] M. Fabrizio, A.O. Gogolin, S. Scheidl. *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 2235 (1994).
- [24] R. Egger, H. Grabert. *Phys. Rev. B*, **55**, 9929 (1997).
- [25] А. Федоров, А. Баранов. *Оптика квантовых точек* (СПб., Недра, 2005).
- [26] Г.С. Геворкян, Ю.Е. Лозовик. *ФТТ*, **27**, 1800 (1985).
- [27] W. Que. *Phys. Rev. B*, **45**, 11 036 (1992).

Редактор Л.В. Беляков

The simplest electron-hole complexes, localized on longitudinal fluctuations of quantum wires

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

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

Abstract The effect of additional localization along quantum wire axis on simplest electron-hole complexes states is studied by means of the variational method. Trial functions with small number of trial parameters that allow one to calculate ground state binding energies of complexes in wide range of structure parameters are suggested. The general forms of these functions are independent of the specific form of the fluctuation. The applicability of our method is illustrated by calculation of binding energies of exciton X^+ - and X^- -trions, localized on parabolic potential. The estimation of the method accuracy in case of fluctuation of arbitrary form is carried out. Accuracy of variation calculation of localized exciton binding energy is estimated by comparison with result of direct diagonalization of exciton Hamiltonian.