

双量子点分子的电子结构

王立民¹⁾²⁾ 罗莹¹⁾ 马本堃¹⁾

¹⁾ 北京师范大学物理系和理论物理研究所, 北京 100875)

²⁾ 河北师范大学物理系, 石家庄 050091)

(2000 年 7 月 25 日收到)

采用推广的 LCAO 方法和有限元方法计算了两个相同量子点组成的双量子点分子的电子结构. 结果表明这种人造分子间的相互作用随两个量子点中心之间距离的变化可实现由共价键向离子键的转变. 对于两个不同的量子点组成的双量子点分子, 利用有限元方法计算了两个量子点中心之间距离、量子点受限势高度以及量子点半径对这种人造分子的电子结构的影响, 定性地说明了 Oosterkamp 等人的实验现象.

关键词: 量子点分子, 电子结构, 共价键, 离子键

PACC: 7155, 7135

1 引 言

随着量子点研究的不断深入, 量子点间的耦合所形成的量子点分子, 既具有与常规分子类似的特点, 又具有区别于常规分子的、新颖的、独特的性质, 使其在未来的量子计算机中的应用价值越来越明显. 因此, 近年来, 量子点分子的研究不论在理论上还是在实验上都引起了人们的高度重视, 因而对这种新型的人造分子进行了大量的研究^[1-9]. 1998 年, Oosterkamp 等人通过测量双量子点分子的微波谱证实了这种人造分子中存在着离子键和共价键^[1], 并且, 根据两点之间的耦合强度, 两个量子点间能够形成离子键或共价键, 共价键导致的成键态与反键态的能量差与电子在二量子点之间的隧穿强度成正比. 该系统显示出了单电子器件中可控的量子相干性, 这正是应用量子点电路的必要条件. 此外, 人们也研究了量子点间相互耦合的强度与这种人造分子性质之间的关系^[2-4], 以及外场(电场、磁场)对量子点分子的影响^[5-9].

由于材料的电子结构对材料的光、电等性质起重要作用, 因此, 量子点分子的电子结构一直是人们关注的课题. 相对于实验研究而言, 关于量子点分子的理论研究比较少, 以前主要集中在单量子点电子结构. 近年来, 研究讨论两个量子点或多个量子点耦合形成的量子点分子的工作逐渐增多^[5,9]. 本文采用以单量子点这种人造原子的单电子本征态为基的

原子轨道线性组合方法^[10]可称之为推广的 LCAO 方法, 和用可直接求解双量子点分子的薛定谔方程的有限元方法^[11]来计算双量子点分子的电子结构. 首先分别采用两种方法研究了两个相同量子点组成的双量子点分子的电子结构, 直观地给出了量子点分子的价键随两个量子点之间距离的变化图像; 然后利用有限元方法研究了两个不同的量子点组成的双量子点分子的电子结构, 讨论了量子点间距, 以及量子点的势阱高度和半径对量子点分子电子态的影响, 并定性地解释了 Oosterkamp 的实验现象^[1].

2 双量子点分子理论模型和计算方法

2.1 理论模型

我们研究的物理模型为圆柱型半导体量子点组成的侧向耦合的双量子点分子, 如图 1 所示. 在有效质量近似下, 在双量子点分子中单电子的 Hamiltonian 为

$$H = p^2/2m^* + V(r), \quad (1)$$

其中第一项是电子的功能, 第二项是电子在量子点分子中的受限势. 本文采用有效的原子单位里德伯 (Rydberg) 能量 (R_y^*) 作为能量的单位, 有效玻尔半径 (a^*) 作为长度的单位, R_y^* 和 a^* 分别为 $m_w^* e^4 / 2\hbar^2 \epsilon_w^2$ 和 $\epsilon_w \hbar^2 / m_w^* e^2$, m_w^* 为量子点材料的电子有效质量, ϵ_w 为介电常数. 为了计算简单, 在不影响定性结果的情况下, 我们忽略了量子点材料与基体材

料的介电常数和电子有效质量不同引起的影响. 如果量子点在 z 方向的限制比 (x, y) 平面的限制大得多, z 方向只有最低的能级被占据, 则 z 方向与 (x, y) 平面的耦合可以忽略^[12,13], 所以, 可以用二维问

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & \sqrt{(x-x_a)^2 + (y-y_a)^2} \leq R_a, \\ V_b, & \sqrt{(x-x_b)^2 + (y-y_b)^2} \leq R_b, \\ V_0, & \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2} > R_i \quad (i = a, b). \end{cases} \quad (3)$$

上式中的 R_a, R_b 和 x_a, y_a, x_b, y_b 分别为 a, b 两个量子点的半径和中心坐标, V_0 是在两个量子点外面势的高度, V_b 是右边量子点内部势高度(即高出左边量子点内部势的差值)图 1 为示意图.

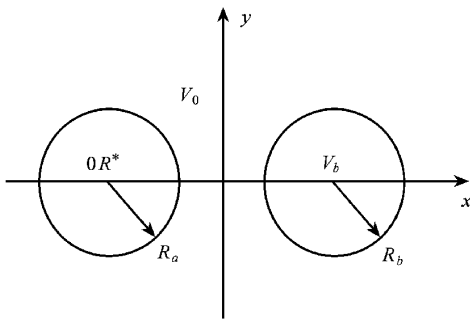


图 1 侧向耦合的二维双量子点分子示意图

2.2 计算方法

首先将用于常规分子研究的 LCAO 方法推广, 使之适用于研究量子点分子. 设 $V = V_a + V_b$, 其中 V_a, V_b 分别为两个量子点的受限势, 则由(2)式可得系统的 Hamiltonian 为

$$H = -\nabla^2 + V_a + V_b. \quad (4)$$

如果两个孤立量子点的单电子波函数分别为 $|a\rangle, |b\rangle$ 基态能量为 E_0 , 即

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle a | -\nabla^2 + V_a | a \rangle \\ &= \langle b | -\nabla^2 + V_b | b \rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

则单电子在两个量子点形成的分子中的波函数 $|\psi\rangle$ 可以近似写为

$$|\psi\rangle = \mu_a |a\rangle + \mu_b |b\rangle, \quad (6)$$

即分子的波函数可看作两个孤立量子点中单电子波函数的线性组合, 其中 μ_a, μ_b 是待定系数, 将这波函数代入薛定谔方程,

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (7)$$

可得到单电子能量 E 为

题来近似处理这个三维问题. 因此, 双量子点分子系统的电子 Hamiltonian 变为

$$H = -\nabla^2 + V(x, y), \quad (2)$$

其中 $V(x, y)$ 的具体形式为

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (8)$$

可见能量 E 是待定系数 μ_a, μ_b 的函数. 根据变分原理, 可得出以下方程组来决定待定系数及能量:

$$\begin{aligned} (E_0 - E)\mu_a - V_2\mu_b &= 0, \\ -V_2\mu_a + (E_0 - E)\mu_b &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \text{其中 } V_2 &= -\langle a | -\nabla^2 + V_a + V_b | b \rangle \\ &= -\langle b | -\nabla^2 + V_a + V_b | a \rangle \\ &= -\langle a | -\nabla^2 + V_b | b \rangle - \langle a | V_a | b \rangle \\ &= -E_0 \langle a | b \rangle - \langle a | V_a | b \rangle \\ &= -E_0 S - K, \end{aligned} \quad (10)$$

S, K 是交叠积分及耦合矩阵元, 它们是两个量子点中心距离 d 的函数. 由方程(9)的系数行列式为零解得两个能量本征值, 其中能量低的态称为成键态, 其能量为

$$E_b = E_0 - V_2, \quad (11)$$

而能量高的态称为反键态, 其能量为

$$E_u = E_0 + V_2. \quad (12)$$

把能量 E_b, E_u 代入(9)式, 则分别得到成键态的线性组合系数 $\mu_a = \mu_b = \sqrt{2}/2$ 和反键态的线性组合系数 $\mu_a = -\mu_b = \sqrt{2}/2$. 可见成键态波函数 $|\psi_b\rangle = (\sqrt{2}/2)(|a\rangle + |b\rangle)$ 相对于两个量子点中心连线的中点是空间对称的, 而反键态波函数 $|\psi_u\rangle = (\sqrt{2}/2)(|a\rangle - |b\rangle)$ 相对于两个量子点中心连线的中点是空间反对称的.

有限元方法是一种比较成熟, 广泛应用于科研和工程的一种计算方法. 该方法首先将求解区域划分为许多小单元(一般为三角形), 在小单元上利用变分法中的 Ritz 法选取基函数(由于单元划分的足够小, 因而很方便), 然后再由近似计算中的差分法把各单元的基函数变成适合整个求解区域的解. 为了检验有限元方法计算的精度, 用有限元方法计算了半径为 $1a^*$ 、受限势为 $40R_y^*$ 的方势阱圆形量子

点的电子结构,同时也应用计算精度非常高的分区级数展开方法^[6]对同一量子点的电子结构进行了精确的计算,两种方法的计算结果一致.例如,有限元方法计算得到的基态能量为 $4.2947R_y^*$,分区级数展开方法的基态能量为 $4.2888R_y^*$,两者相差仅为 $0.0059R_y^*$.然而,有限元方法的优点是具有比级数解法能更有效的处理复杂的边界条件的功能,非常适用于计算量子点分子的电子结构,可以直接求解量子点分子的单电子薛定谔方程.

3 计算结果及分析

3.1 三种量子点分子的电子结构随量子点之间距离的变化

1. 第一种情形

两个相同的量子点形成的量子点分子的电子结构随量子点之间距离的变化,此时受限势(3)式 $V(x,y)$ 中 $R_a = R_b = 1a^*$, $V_0 = 40R_y^*$, $V_b = 0R_y^*$.

首先,采用推广的 LCAO 方法,以分区级数展开方法^[14]得到的量子点中单电子的基态能和波函数(1s 态)代入(6)式和(9)式,就可以得到成键能级 E_b 与反键能级 E_u 随两个量子点中心距离 d 的变化趋势,如图 2 中虚线所示,此时只考虑了两个量子点

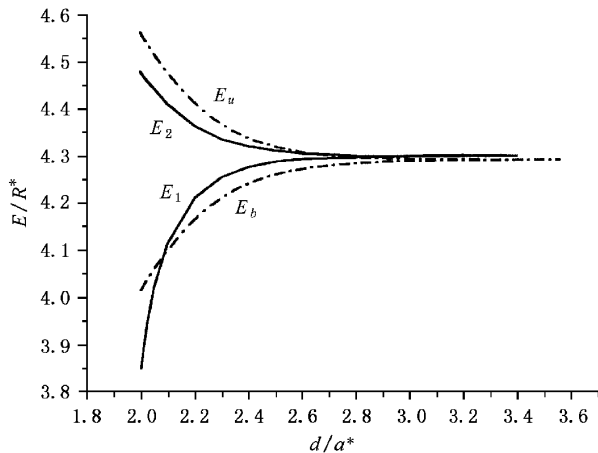


图 2 第一种情形的侧向耦合的双量子点分子的单电子能级随量子点中心距离 d 的变化模式(虚线是推广的 LCAO 方法的计算结果, E_b 表示成键能级, E_u 表示反键能级;实线是有限元方法的计算结果, E_1 是基态能级, E_2 是第一激发态能级)

的单电子 1s 态耦合的情况.由图 2 中虚线可以看出成键能和反键能之间的能隙随距离加大而逐渐变小,即两个量子点之间的相互作用随距离增大而逐

渐减小,这是因为两个量子点基态波函数的交叠积分随距离增大而逐渐减小.相应的成键波函数和反键波函数由成键态的系数 $\mu_a = \mu_b = \sqrt{2}/2$ 和反键态的系数 $\mu_a = -\mu_b = \sqrt{2}/2$ 决定,并由此可以知道二者分别是空间对称和空间反对称的.

然后,再用有限元方法求解这种量子点分子的单电子薛定谔方程,得到的最低的两个能级随量子点中心间的距离变化(图 2 中的实线).与虚线比较,可以看出这里的基态能量 E_1 、第一激发态能量 E_2 的变化与 LCAO 近似的两个 1s 态组成的成键能级和反键能级相对应,这还可以由图 3 中对应于基态、激发态的波函数形状得到确认.而且可以发现两种方法的结果既有共同处,又存在着一些差异,相同之处是随着两个量子点中心间距离的增加,两种方法都给出这两个能级趋向孤立量子点的基态能,即对应着没有相互作用的两个量子点的基态能级;不同之处是当 d 很小时,成键态的能级要比 LCAO 近似得出的能量低得多,而反键态的能量与 LCAO 近似得出的结果接近,这说明 LCAO 近似在两个量子点很近时误差较大.用有限元方法可给出随着两量子点中心的距离的不断增大,由单量子点基态组成的共价键逐步消失,离子键逐步形成,这可由图 3 中不同距离时的相应波函数形状得出;当两点中心距离继续增大时,此二能量趋于二度简并,对应着量子点间没有相互作用孤立的量子点的基态能级.这里还给出了第二激发态至第五激发态的能量随距离的变化(图 4)这与推广的 LCAO 方法的两个 1p 波函数形成成键和反键态情况相对应,这是因为二维单量子点的 1p 能级是二度简并的,所以两个量子点耦合会出现了四个能级.

由以上结果可以看出,虽然有限元法得出的能量与 LCAO 近似所得的极限值相同并趋向于简并,但在趋近过程中却显示出共价键逐步转化为离子键,即通过调整两个量子点的距离便可以实现共价键向离子键的转变,这是常规分子所不能得到的.

2. 第二种情况

讨论两个半径不同的量子点构成的量子点分子的电子结构随量子点之间距离的变化,选取受限势 $V(x,y)$ 中 $R_a = 1a^*$, $R_b = 0.8a^*$, $V_0 = 40R_y^*$, $V_b = 0R_y^*$.直接采用有限元方法求解这种情况下量子点分子中单电子的薛定谔方程,得到各个本征能级随距离的变化形式及相应的本征波函数,如图 5 所示.

由各个本征态的波函数形状知道电子主要局域

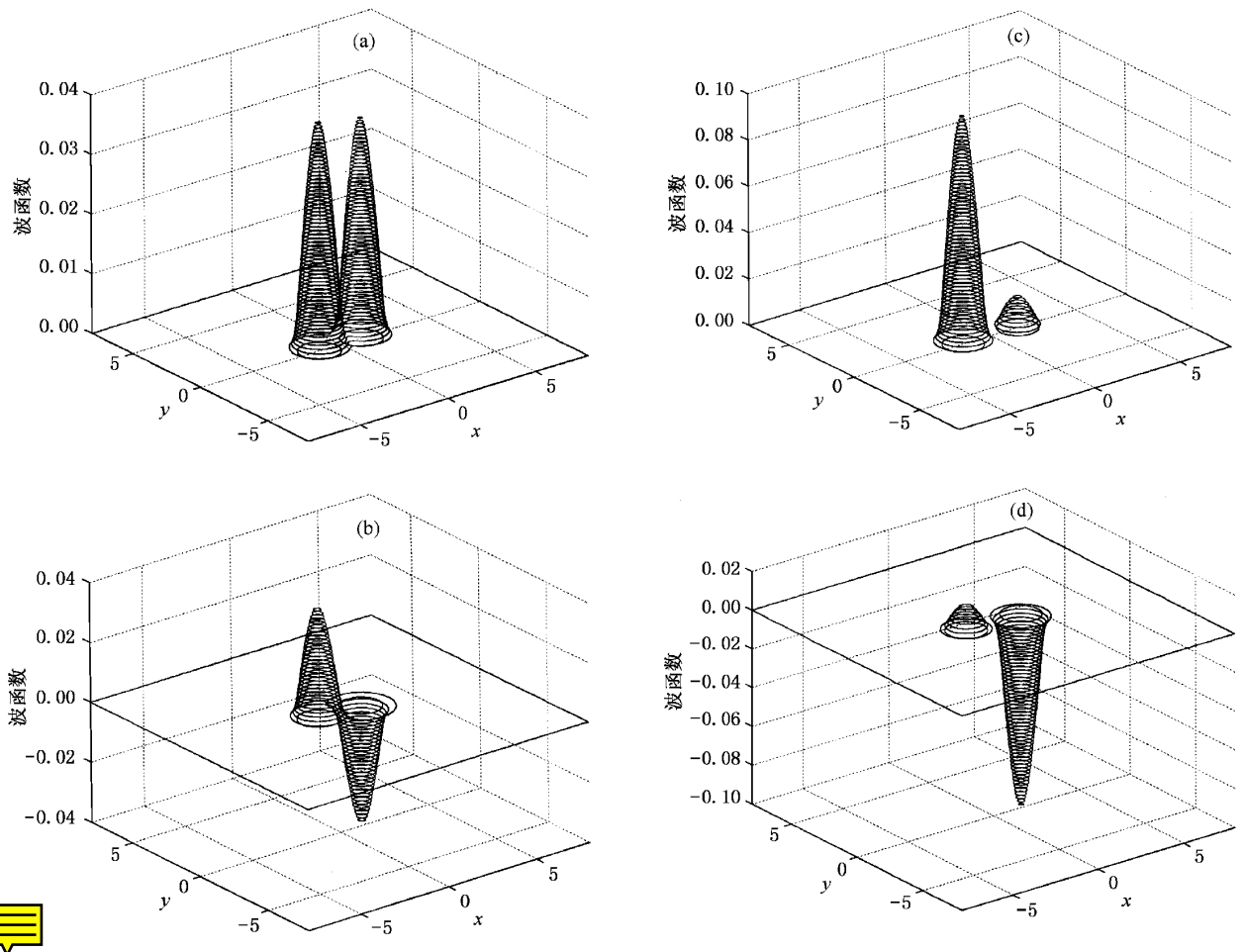


图3 有限元方法得到的基态 E_1 波函数和第一激发态 E_2 的波函数 (a)和(b)分别是量子点中心间距为 $2.5a^*$ 时的基态波函数和第一激发态的波函数 (c)和(d)分别是量子点中心间距为 $3.2a^*$ 时的基态波函数和第一激发态的波函数对应. 可见它们都是单个量子点的 $1s$ 电子态的线性组合, 与推广的 LACO 方法一致, 即基态实际是两个 $1s$ 轨道组成的成键态 E_b , 第一激发态是两个 $1s$ 轨道组成的反键态 E_u .

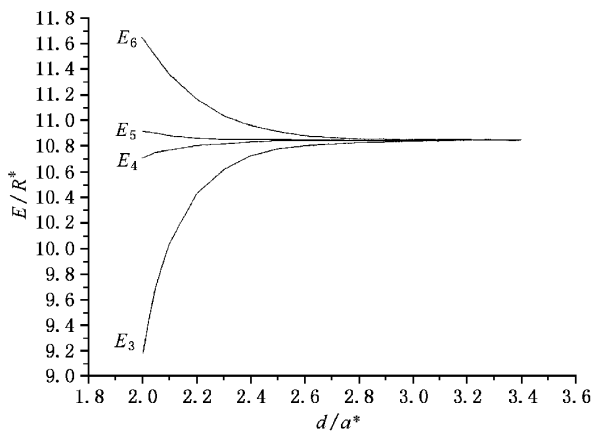


图4 有限元方法得到的激发态 E_3, E_4, E_5, E_6 各能级随量子点中心距离 d 的变化形式. 由相应的波函数可以知道它们是二维单量子点的 $1p$ 轨道的线性组合(由于二维单量子点的 $1p$ 能级是二度简并的, 所以两个量子点耦合出现了四个组合方式, 并对应四个能级

在一个量子点中, 例如处于 E_1 的电子主要在量子点 a 中运动(见图 5(b)), 而处于 E_2 的电子主要在量子点 b 中运动(见图 5(c)). 这种情况即使在两个量子点之间的距离很小时也是如此, 这正是 Osterkamp 等人所测到的离子键. 当两量子点中心之间距离很小时, 即两个点之间的势垒厚度很小时, 因电子很容易在两个量子点之间发生隧穿, 系统的能量比孤立量子点的基态能量降低得较多, 说明两个量子点之间有较强的相互作用; 随着两量子点中心之间距离的增大, 两个点之间的势垒厚度逐渐增大, 隧穿不再容易发生, 系统的能量逐渐趋向于孤立量子点中的单电子能量(E_1 趋向于孤立量子点 a 的基态能级, E_2 趋向于孤立量子点 b 的基态能级). 更高的各本征态随量子点中心间距的变化也具有相同的性质.

3. 第三种情形

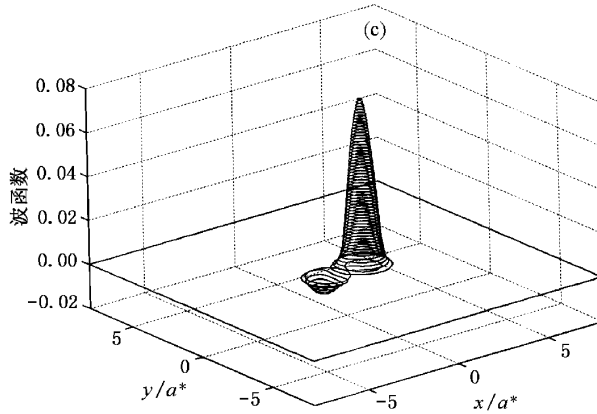
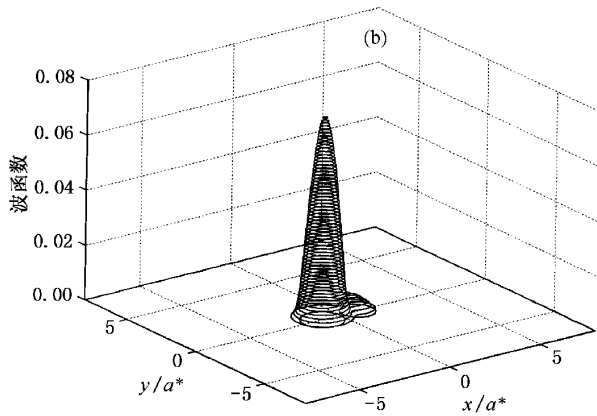
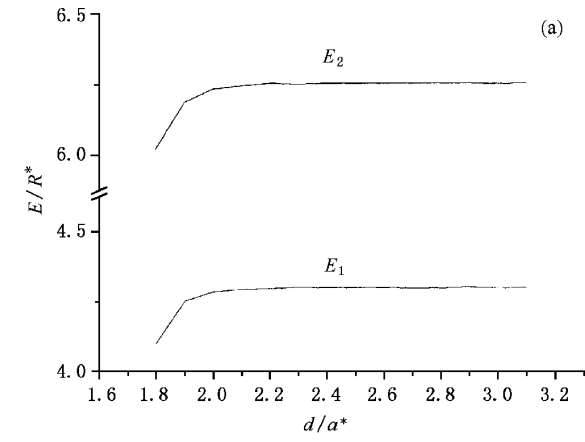


图5 第二种情况的量子点分子的单电子本征态 (a)为本征能级 E_1, E_2 随量子点中心间距 d 的变化 (b)(c)为量子点中心间距 $d = 1.9a^*$ 时的本征态 E_1, E_2 对应的波函数

两个阱深不同的量子点构成的量子点分子的单电子的电子结构随量子点之间距离的变化, 选取受限势 $V(x, y)$ 中 $R_a = 1a^*, R_b = 1.0a^*, V_0 = 40R_y^*, V_b = 20R_y^*$. 直接采用有限元方法求解此时

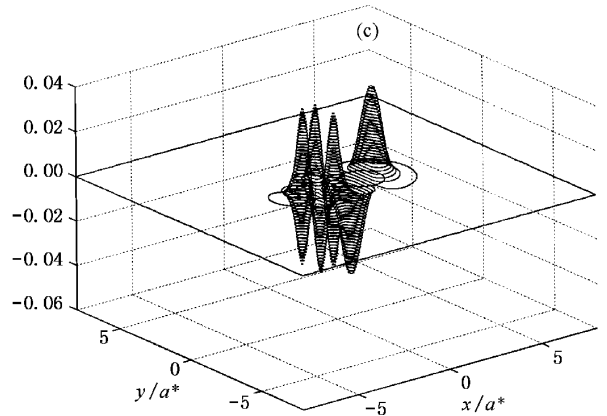
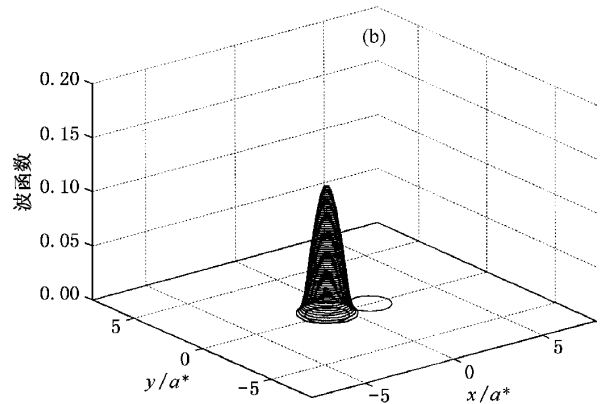
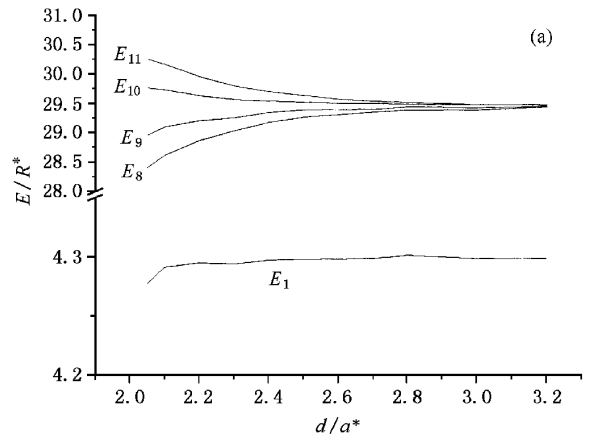


图6 第三种情况的量子点分子的电子结构 (a)电子的某些本征能级随量子点中心间距 d 的变化 (b)当两个量子点的中心距离 $d = 2.4a^*$ 时, 对应能级 $E_1 = 4.298R_y^*$ 的波函数 (c)当两个量子点的中心距离 $d = 2.4a^*$ 时, 对应能级 $E_8 = 29.0984R_y^*$ 的波函数. 由本征波函数的形状可以知道 E_8 的波函数是孤立量子点 a 的 E_5' 波函数与孤立量子点 b 的 E_2' 波函数的线性组合成的成键态, E_9 的波函数是孤立量子点 a 的 E_6' 波函数与孤立量子点 b 的 E_3' 波函数的线性组合成的成键态, 对应能级 E_{10} 的波函数是孤立量子点 a 的 E_6' 波函数与孤立量子点 b 的 E_3' 波函数的线性组合成的反成键态. 对应能级 E_{11} 的波函数是孤立量子点 a 的 E_5' 波函数与孤立量子点 b 的 E_2' 波函数的线性组合成的反成键态

的单电子薛定谔方程,得到各个本征能级随距离的变化形式及相应的本征波函数,如图 6 所示.由图 6 (a)可以看出这种分子的本征能级随着距离的变化形式有两类:变化形式与第一种分子相同的 E_8 至 E_{11} 这一类能级一定相应于共价键的成键能级和反键能级,这个结论同样可以由这四个能级的波函数得到确认;另一类是与第二种分子的变化形式相同的包括 E_1 在内的能级,从它们的波函数可知,这类能级是离子键的能级.可见这种量子点分子中既有共价键又有离子键,与电子所处的能级有关.

我们发现之所以出现对应于共价键的能级 E_8 至 E_{11} 主要是由于孤立量子点 a 的能级 E'_5, E'_6 与孤立量子点 b 的能级 E'_2, E'_3 很接近,几乎相等,由于量子点之间的耦合正是这几个能级以共价键形式存在的主要原因,所以其余一些能级以离子键的形式存在是由于 a, b 两个量子点的能级不匹配(能级相差很大)造成的.这个结论与 Blick 等人的实验结果^[15]一致.

3.2 下面研究量子点的受限势高度及半径对双量子点分子电子结构的影响

首先研究受限势高度对量子点分子电子结构的影响.此时选取 $V(x, y)$ 中 $R_a = R_b = 1a^*$, $V_0 = 40R_y^*$, $x_a = -1.1a^*$, $x_b = 1.1a^*$, $y_a = y_b = 0.0a^*$, 在保持这些参量不变的情况下不断改变 V_b 的值,对不同的 V_b 利用有限元方法求解二维量子点分子中的单电子薛定谔方程就可以得到量子点分子的单电子本征能级随 V_b 的变化曲线($V_b > 1R_y^*$ 因为 $V_b = 0R_y^*$ 附近是两个相同的量子点).图 7(a)是单电子的基态能 E_1 随 V_b 的依赖关系((c) (c')是相应的波函数),可见随着 V_b 的增大,电子的受限程度逐渐增强,基态能则不断增加.其余各个本征能级随量子点 b 的阱底高度 V_b 的变化如图 7(b)所示.为了分析能级随 V_b 的变化规律,图 7(b)中用虚线给出了相应的孤立量子点 b 当量子点 a 不存在时的本征能级随阱底高度 V_b 的变化关系.

由图 7(b)看出,随着量子点 b 阱底 V_b 的升高, E_1 基本是量子点 a 的基态能量加以微扰修正; E_2 由量子点 b 的基态微扰修正过渡到量子点 a 的第一激发态的能量微扰修正(参看图 7(d_1)) (d_2), (d_3)); E_3 基本保持在量子点 a 的第二激发态能量附近(与量子点 a 的第一激发态能量简并); E_4 由量子点 a 的第二激发态微扰修正能量在 $V_b =$

$6.75R_y^*$ 附近逐步过渡到量子点 b 的基态的微扰修正能量,又在 $V_b = 16R_y^*$ 附近过渡到量子点 a 的第三激发态的微扰修正能量(与第四激发态能量简并); E_5 由量子点 b 的第一激发态的微扰修正能量(与第二激发态能量简并)在 $V_b = 9R_y^*$ 附近过渡到量子点 a 的第四激发态的微扰修正能量(与第三激发态能量简并); E_6 由量子点 b 的第二激发态的微扰修正能量(与第一激发态能量简并)在 $V_b = 9R_y^*$ 附近过渡到量子点 a 的第四激发态的微扰修正能量(与第三激发态能量简并),然后在 $V_b = 16R_y^*$ 附近过渡到量子点 b 基态的微扰修正能量,又在 $V_b = 18R_y^*$ 附近过渡到量子点 a 的第五激发态的微扰修正能量(非简并);其余的能级变化依次类推.产生这些过渡的原因在于:当量子点 b 阱底逐渐升高时,相应的孤立量子点的各个本征能级也相应升高.当两个孤立量子点的能级接近时,两个量子点之间会发生共振隧穿,引起很强的能量改变.这时量子点之间的相互作用对应着很强的共价键,电子的波函数在量子点分子中是扩展的.因此,可以认为量子点分子的单电子能级结构大体上由相应的两个孤立量子点的能级加以微扰修正构成,在一些特殊的 V_b 值附近,量子点 a 中的某一单电子能级与量子点 b 中的某一单电子能级在数值上相等或接近,即此时的微扰引起能级简并的取消,量子点分子是以共价键的形式存在的,电子在量子点中出现较强的共振隧穿,相应的能级发生共振劈裂^[16].这里存在三种耦合方式,即单态与单态的耦合(如 $V_b = 17.5R_y^*$ 附近),单态与双态的耦合(如 $V_b = 6.75R_y^*$ 附近),以及双态之间的耦合(如 $V_b = 8.8R_y^*$ 附近).所有的耦合形式都是消除简并形成新的态,这些态对应于价键理论的成键态和反键态.

另外,我们还计算了量子点半径对量子点分子电子结构的影响,保持两个量子点之间的势垒厚度为 $0.2a^*$,两个量子点的阱深都保持为 $40R_y^*$ (令 $V_b = 0R_y^*$)然后逐渐改变量子点 b 的半径大小 R_b ,由此改变系统的本征能级,则得到系统本征能级随半径变化的关系,如图 8 所示.图 8 中的虚线是相应的孤立量子点 b 的最低三个能级随半径变化的关系.由图 8 可以看出量子点之间的相互作用受半径的影响与受势阱深度的影响相似,即随着量子点半径 R_b 增大(相应的各个本征能级逐渐降低)两个量子点的相互作用以离子键和共价键方式交替出现.在出现共价键的 R_b 处的细微图与特殊的 V_b 处类似.

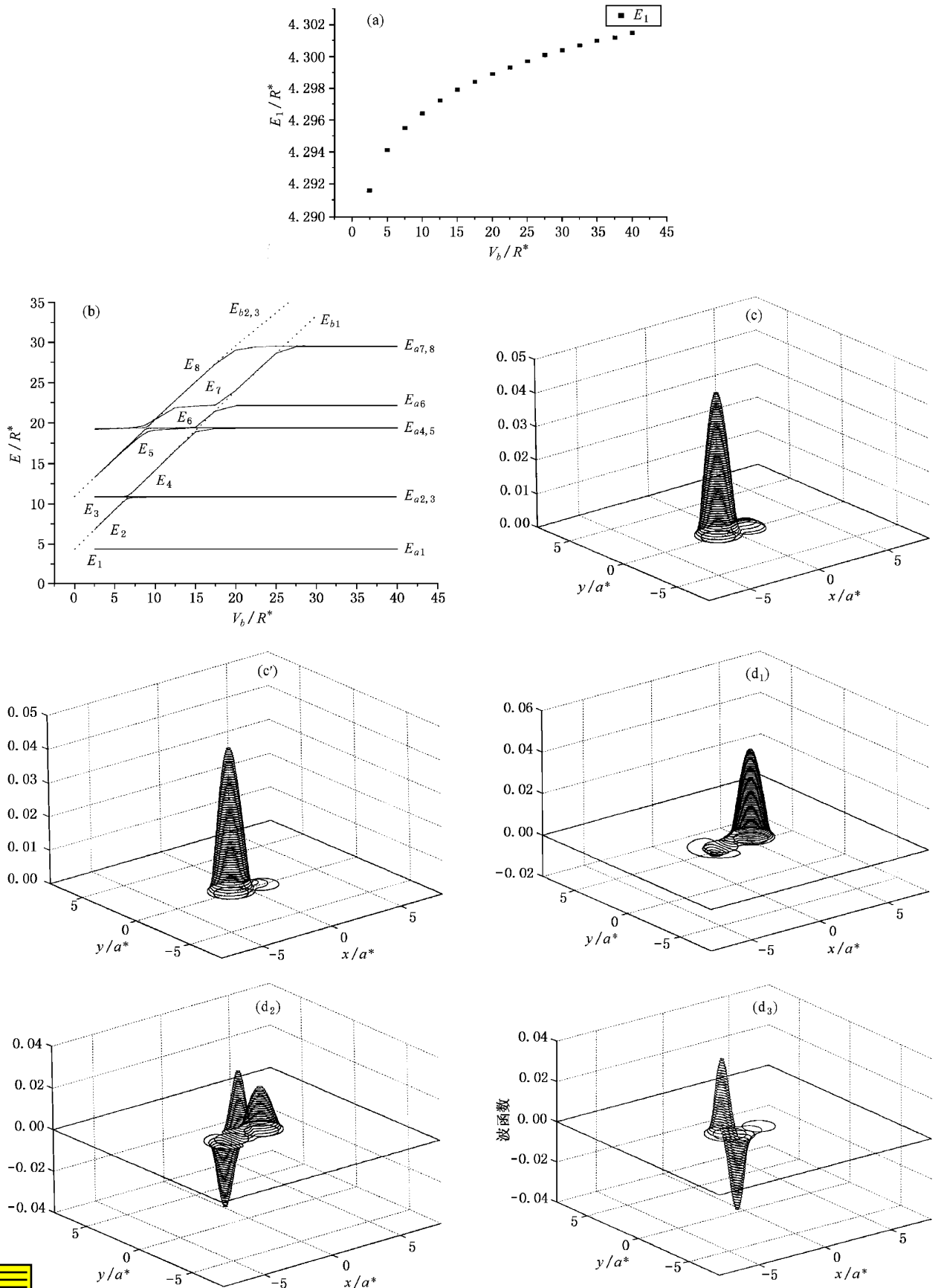


图7 势阱深度对量子点分子的电子结构的影响 (a)基态能 E_1 随 V_b 的变化 (b)前八个本征能级随 V_b 的变化 (c)和(c')为 $V_b = 1.0R_y^*$ 、 $2.5R_y^*$ 时 E_1 对应的波函数,可见电子主要在量子点 a 中运动,对应离子键 (d1)(d2)(d3)是 $V_b = 4.5R_y^*$ 、 $6.75R_y^*$ 、 $12R_y^*$ 时, $E_2 = 8.70R_y^*$ 、 $10.66R_y^*$ 、 $10.80R_y^*$ 对应的波函数形状,可见此时的 E_2 由离子键(电子主要在量子点 b 中运动)转变为共价键(电子在量子点 a、b 中的运动概率相当),又转变为离子键(电子主要在量子点 a 中运动)

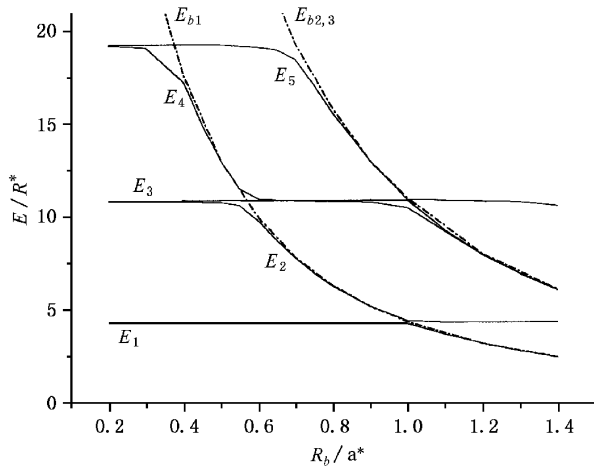


图 8 系统本征能级 E_1 至 E_5 随右边量子点半径的变化(虚线表示孤立量子点 b 的最低两个本征能级随半径 R_b 的变化)

总结以上计算结果,可以得到结论:两个不同量子点的电子是可以以量子相干形式强烈地耦合到一起的,其前提条件是它们的能级之间要有匹配的能级存在.当两个量子点的能级不匹配时,量子点之间的作用主要以离了键的形式存在,这时的相互作用比较弱.

4 结 论

通过以上计算得出了由相同的量子点构成的二维双量子点分子的单电子成键能级和反键能级随量子点中心之间的距离变化形式,及其波函数是对称态和反对称态的,随着两个量子点之间的势垒厚度($d - R_a - R_b$)的增加,成键态与反键态之间的能量分裂间距的大小随着减小.因此可调节势垒的厚度来控制两个量子点之间的耦合强度,分为“弱耦合”和“强耦合”,同时随着耦合强度的由强转弱,这种双量子点分子的化学键也由共价键转变成离子键.而两个不同的量子点组成的分子中的单电子状态依赖于两个相应孤立量子点的能级结构,能级相互匹配时,相应的电子态可能为共价键(至于其他因素的影响,我们在进一步研究),能级相互不匹配时,相应的电子态为离子键.调节量子点的势垒高度或半径大小可以改变量子点的能级匹配情况,因而就可以调整量子点之间的耦合强度,形成共价键或离子键.这些计算结果定性上说明了 Oosterkamp 等人的实验结果.

- [1] T. H. Oosterkamp, T. Fujisawa, W. G. van der Wiel *et al.*, *Nature* **395** (1998) 873.
- [2] S. Tarucha, T. Honda, D. G. Austing *et al.*, *Physica* **E3** (1998), 112.
- [3] T. Fujisawa, T. H. Oosterkamp, W. G. van der Wiel, B. W. Broer, R. Aguado, S. Tarucha, L. P. Kouwenhoven, *Science* **282** (1998) 932.
- [4] Naoki Fujita, Fujio Wakaya, Yoshihiko Yuba, Kenji Gamo, *Physica* **E7** (2000) A20.
- [5] Yasuhiro Asano, *Phys. Rev.* **B58** (1998) 1414.
- [6] S. M. Maurer, S. R. Patel, C. M. Marcus, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 1403.
- [7] X. H. Xu, H. Jiang, X. Sun, H. Q. Lin, *Physica* **B279** (2000), 214.
- [8] Teemu Pohjola *et al.*, *Physica* **B284 - 288** (2000) 1762.
- [9] T. Schmidt, R. J. Haug *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 1544.
- [10] Bing-lin Gu, Xi-kun Wang, *Solid State Physics* (Press of Tsinghua University, Beijing, 1989), p. 137 (in Chinese [顾秉林、王喜坤, 固体物理学, 清华大学出版社(1989), p. 137]).
- [11] P. L. George, *Automatic Mesh Generation - Application to Finite Element Methods*, WILEY, 1991.
- [12] F. M. Peeters *et al.*, *Phys. Rev.* **B53** (1996) 1468.
- [13] R. P. Rice, X. Shu, S. D. DarMaetla, *Phys. Rev.* **B51** (1995), 2017.
- [14] Jia-Lin Zhu *et al.*, *Phys. Rev.* **B41** (1990) 6001.
- [15] R. H. Blick, R. J. Haug, J. Weis *et al.*, *Phys. Rev.* **B53** (1996) 7899.
- [16] Yong Guo, Bing-lin Gu, *Acta Physica Sinica* **48** (1999) 1733 (in Chinese [郭永、顾秉林, 物理学报 **48** (1999) 1733]).

ELECTRONIC STRUCTURE OF DOUBLE QUANTUM-DOT MOLECULE

WANG LI-MIN^{1,2)} LUO YING¹⁾ MA BEN-KUN¹⁾

¹⁾*(Department of Physics and Institute of Theoretical Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)*

²⁾*(Department of Physics, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050091, China)*

(Received 25 July 2000)

ABSTRACT

We calculated the electronic structure of double quantum-dot molecule with a generalized LCAO approach and the finite element method. Compared with real molecule, the quantum dot molecule can be in the form of covalent bonding or ionic bonding between the two same (or different) quantum dots under different conditions. The condition is related to the distance between the two quantum dots and the energy of each quantum dot. The effects of the potential and radius of the quantum dots on the electronic structure have also been studied with the finite element method.

Keywords : quantum-dot molecule , electronic structure , covalent bonding , ionic bonding

PACC : 7155 , 7135