

施主中心量子点能谱分析

谷 娟 梁九卿

(山西大学理论物理研究所,太原 030006)

(2004 年 12 月 10 日收到,2005 年 3 月 30 日收到修改稿)

在有效质量近似下,使用数值矩阵对角化的方法,得到了高斯束缚势下施主中心量子点的能谱,并与简谐势相比较.结果显示施主中心量子点基态及低激发态的性质主要取决于量子点的尺寸、束缚势的强度及形状.

关键词:施主中心量子点,高斯势阱,能谱

PACC: 7190, 7320D

1. 引 言

少体物理以为数不多的粒子(三至五个)组成的系统作为研究对象,由于涉及的自由度还不太多,人们希望通过适当的方法求解并达到预期的精确度,其任务是探索微观少体系统的结构和内部运动形态,探索相互作用的性质,以及检验多体力的作用.近年来,由于晶体生长技术的发展,对二维量子阱、一维量子线和零维量子点等低维量子结构的理论研究和实验研究越来越广泛,已发展成为一个引人注目的新领域^[1-5].人们通过控制门电压,可以使量子点内的电子数从 1 开始逐个增加,从而形成少电子系统.它们遵从量子力学规律,有极强的量子效应.施主中心量子点由位于量子点中心的一个带正电的离子以及两个受其束缚的电子组成,它类似于一个带负电的氢离子(H^-)^[6].施主中心量子点是最简单的不能够精确求解的多电子系统之一.最近,许多实验^[7-9]和理论^[10-17]都在关注准二维系统施主中心量子点的存在问题,Xie 等利用少体物理的方法计算了存在磁场作用时简谐势束缚下施主中心量子点系统的束缚态能谱^[14-17].侧束缚可以被认为是二维的^[18].在许多研究中,简谐势被用来描述侧束缚.然而,抛物势没有有限的深度和范围,一些实验结果建议真实的束缚势应是非抛物形的阱状势,高斯势阱 $V(r) = -V_0 \exp(-r^2/2R^2)$ ^[18] 是一个很好的近似,它平滑并具有有限的深度(V_0)和有限的半径(R).Adamowski 等^[19]研究了在假想高斯势阱束缚下的两电子量子点系统,并讨论了它的抛物近似.Xie 计算了高斯势阱中两电子量子点的能谱^[20].本文利用数

值矩阵对角化的方法计算高斯势束缚下施主中心量子点系统能谱并讨论其特性.

在这里,我们利用少体物理的方法计算高斯束缚势中施主中心量子点系统能谱.结果表明施主中心量子点系统基态及低激发态的能级性质主要取决于量子点的尺寸以及束缚势的强度和形状.

2. 理论模型和计算方法

施主中心盘状量子点系统由两个电子和位于盘状量子点中心的一个带正电的施主杂质构成,我们忽略电子有效质量的差异以及量子点区域和周围介质介电常数的差异,它在强束缚和较小的介电常数差异下是合理的.在有效质量近似下施主中心量子点系统的 Hamilton 量写为

$$H = \sum_{i=1,2} \left[\frac{p_i^2}{2m_e^*} + V(r_i) - \frac{e^2}{\epsilon r_i} \right] + \frac{e^2}{\epsilon r_{12}}, \quad (1)$$

$$V(r_i) = -V_0 \exp\left(-\frac{r_i^2}{2R^2}\right), \quad (2)$$

其中 m_e^* 为电子的有效质量, r_i (p_i) 是第 i 个电子距离量子点中心的位矢(动量矢量), $r_{12} = |r_1 - r_2|$ 是电子间的距离, ϵ 是量子点的介电常数, V_0 是势阱的高度且 $V_0 > 0$, R 描述束缚势的范围相应于量子点的半径.对于 $r/R \ll 1$,高斯势可以由简谐势近似.

引入质心坐标 $R = (r_1 + r_2)/2$ 和相对坐标 $r = r_{12} = r_1 - r_2$, 这时哈密顿方程可以写成

$$H = H_0 + U + V. \quad (3)$$

这里引入了谐振子势

$$H_0 = \sum_{i=1,2} \left[\frac{p_i^2}{2m_e^*} + \frac{1}{2} m_i \omega^2 r_i^2 \right] \\ = \frac{P_R^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 R^2 + \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2, \quad (4)$$

$$U = \sum_{i=1,2} \left[-V_0 \exp\left(-\frac{r_i^2}{2R^2}\right) - \frac{1}{2} m_i \omega^2 r_i^2 - \frac{e^2}{\epsilon r_i} \right], \quad (5)$$

$$V = \frac{e^2}{\epsilon r_{12}}, \quad (6)$$

其中 $M = 2m_2^*$, $\mu = m_e^*/2$; ω 是简谐势的圆频率.

为了得到本征能量,我们在二维谐振子乘积基

展开的空间中将 H 对角化

$$\Phi_{[K]} = \tilde{A} \left\{ \left[\phi_{n_1 l_1}^\omega(\mathbf{R}) \phi_{n_2 l_2}^\omega(\mathbf{r}) \right]_{L \chi_S} \right\}, \quad (7)$$

这里 $\chi_S = [\xi(1)\xi(2)]_S$, $\xi(i)$ 是第 i 个电子的自旋波函数,角标 S 是两电子耦合的总自旋量子数; ϕ_{nl}^ω 是频率为 ω 的二维谐振子波函数(ω 作为可调的变分参数),且能量为 $(2n + |l| + 1)\hbar\omega$; \tilde{A} 是反对称化算符 $[K]$ 代表整个量子数空间 (n_1, l_1, n_2, l_2) , $l_1 + l_2 = L$ 是总轨道角动量,为了保证波函数的反对称性,如果自旋 $S = 1$ 则 l_2 只能取奇数,若 $S = 0$ 则 l_2 只能取偶数.这样 H 的矩阵元可以表示成

$$\Phi_{[K]} | H_0 | \Phi_{[K']} = [\chi(n_1 + n_2) + |l_1| + |l_2| + 2] \hbar \omega \delta_{[K][K']}, \quad (8)$$

$$\Phi_{[K]} | U | \Phi_{[K']} = \sum_{[K''I K''']} B_{[K I K'']} B_{[K' I K''']} \left[U_{n_1' n_1''}^1 \delta_{n_2' n_2''} + U_{n_2' n_2''}^1 \delta_{n_1' n_1''} \right] \delta_{r_1' r_1''} \delta_{r_2' r_2''}, \\ \Phi_{[K]} | V | \Phi_{[K']} = U_{n_2' n_2''}^{\parallel} \delta_{n_1' n_1''} \delta_{l_1' l_1''} \delta_{l_2' l_2''}, \quad (9)$$

式中

$$U_{n_i' n_i''}^1 = \int_0^\infty R_{n_i} l_i(r_i) \left[-V_0 \exp(-r_i^2/2R^2) - \frac{1}{2} m_i \omega^2 r_i^2 - \frac{e^2}{\epsilon r_i} \right] R_{n_i l_i}(r_i) r_i dr_i, \quad (10)$$

$$U_{m m'}^{\parallel} = \int_0^\infty R_m(r) \left[\frac{e^2}{\epsilon r} \right] R_{m'}(r) r dr, \quad (11)$$

$$B_{[K I K']} = \int \Phi_{[K]}^*(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \Phi_{[K']}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) d\mathbf{R} d\mathbf{r}, \quad (12)$$

式中 $R_m(r)$ 是二维谐振子的径向波函数; $B_{[K I K']}$ 是二维谐振子乘积态关于不同坐标表示的变换系数(GTM 系数)^[21],只有当 $\Phi_{[K]}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ 和 $\Phi_{[K']}(\mathbf{R}', \mathbf{r}')$ 有相同的本征能量和总角动量时 $B_{[K I K']}$ 才不为零; $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_1$, $\mathbf{R}' = -\mathbf{r}_2$. 计算的维度被限制在 $0 \leq N = \chi(n_1 + n_2) + |l_1| + |l_2| \leq 26$ 之中,当 N 以二增加基态本征值的变化与其本征值的比率小于 0.01% 时即认为其收敛.计算中将谐振子强度参数 ω 作为变分参数,选取 ω 使基态能量取最小值.

3. 数值结果

我们运用上面讲的方法讨论高斯势与谐振势中施主中心量子点系统基态及低激发态能级的性质.我们的数值计算在 GaAs 半导体材料中进行, GaAs 材料的介电常数 $\epsilon = 12.4$, 传导电子的有效质量 $m_e^* = 0.067 m_e$ (m_e 是自由电子的质量), 传导电子的有效玻尔半径 $a^* = \epsilon a_B / m_e^*$ 可达 10nm. 定义量子点半径 $R = \sqrt{\hbar \chi(m_e^* \omega)} \approx 33.708 / \sqrt{\hbar \omega}$ 作为和侧束缚势

相关的特征长度.

首先取势阱深度 $V_0 = 150 \text{meV}$, 作施主中心量子点系统基态及低激发态随量子点半径 ($R \leq 30 \text{nm}$) 变化的能谱(图 1), 图中实线和虚线分别代表高斯势和谐振势情况. 能级由量子数 $[L, S]$ 标注. 对应于总角动量 $L = 0$ 和 $L = 1$, 自旋单态及自旋三重态分别表示为 $|0, 0\rangle$, $|0, 1\rangle$ 和 $|1, 0\rangle$, $|1, 1\rangle$. 图 1 显示高斯势与谐振势中的能级在定性上是相似的, 它们都随着 R 的增加逐渐减小. 然而, 定量上的差异也是很明显的. 在强束缚时 ($R \leq 10 \text{nm}$) 高斯势中的能量明显低于谐振势, R/a^* 越大, 高斯势与谐振势的能级差异越小, 随着 R 的增大它们的能量值都趋于常数. 只有对于较大的量子点, 谐振势才可以看作高斯势的近似. 另外, 我们发现激发态能量的变化明显小于基态能量的变化. 与两电子量子点系统^[22] 相比较容易看出随着量子点半径的增加能级交叉没有出现. 这就表明两电子系统的电子属性在量子点中心是否存在正电荷的两种情况下是不同的, 这主要是因为电子与正电荷的吸引相互作用使电子尽可能位

于量子点中心施主杂质附近,从而尽可能减小势能.

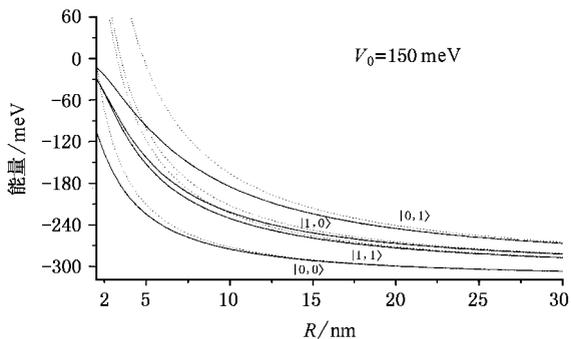


图 1 施主中心量子点系统基态及低级激发态随量子点半径 R 变化的能谱图. 图中的实线和虚线分别代表高斯势和谐振势情况. 能级由量子数 $|L, S\rangle$ 标注. $V_0 = 150\text{meV}$.

接下来我们取势阱深度 $V_0 = 9\text{meV}$ 作图 2, 从图中容易看出图 2 与图 1 能级有定性上的相似性也有定量上的差异. 我们得到谐振势与高斯势能级的差异随着势阱深度的减小而增大. 对于较深的势阱谐振势能够被当作高斯势较好的近似. 这一结果与 Xie 给出的结论^[23]一致. 从图 1 与图 2 的比较不难看出随着 V_0 的减小能量增加, 这是因为束缚势减小从而能量增加.

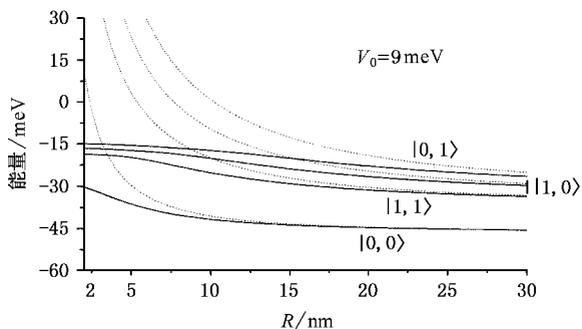


图 2 施主中心量子点系统基态及低级激发态随量子点半径 R 变化的能谱图. 图中的实线和虚线分别代表高斯势和谐振势情况. 能级由量子数 $|L, S\rangle$ 标注. $V_0 = 9\text{meV}$.

从图 1 和图 2 均可看出施主中心量子点系统能级排序为 $|0,0\rangle, |1,1\rangle, |1,0\rangle, |0,1\rangle$. 这是因为当 $S = 0$ 时, l_2 只能取偶数即 l_2 可以取为 0, 这时 l_1 和 l_2 均可取为 0, 故能级最低, $|0,0\rangle$ 为基态, 而当 $S = 1$ 时, l_2 只能取奇数即 l_2 最少取为 1, 为了使 $L = 0$, l_1 也必须为 1, 即 $(l_1, l_2)_L = (1, 1)_{L=0}$, 因此能量较高. 另一方面, 当 $S = 1$ 时, 自旋波函数对粒子交换是对称的, 因此空间波函数 $\Psi_L(1, 2)$ 必须是反对称的, 即 $\Psi_L(1, 2) = -\Psi_L(2, 1)$. 若电子处于对量子点中心对称的位置, 则电子的交换等价于空间反演, 即 $\Psi_L(2, 1) = P\Psi_L(1, 2)$ 其中 P 是反演算符, 又因 $P\Psi_L(1, 2) = (-1)^L\Psi_L(1, 2)$, 故当电子处于对量子点中心对称的位置上时, 有 $\Psi_L(1, 2) = -(-1)^L\Psi_L(1, 2) = (-1)^{L+1}\Psi_L(1, 2)$, 因此, 当 $L = 0$ 时, $\Psi_L(1, 2)$ 只能取为零即波函数在对称位置上出现了节点, 这将导致能量升高. 一般来说, 自旋三重态总是拥有较低的能量, 因为空间波函数的反对称性使两个电子分开从而减小了库仑排斥势. 然而, 应该指出这里也有例外, 基态结构在同一空间态中包含两个电子, 两个电子的自旋必须相反, 只能由自旋单态构成. 因此, 任意两电子“原子”的基态必须是自旋单态. 从上面的分析, 很明显施主中心量子点系统的第二个束缚态是 $|1,1\rangle$ 态, 第三个束缚态是 $|1,0\rangle$ 态, 而 $|0,1\rangle$ 态能量最高.

4. 结 论

本文运用少体物理的方法得到了施主中心量子点系统基态及低激发态的能谱, 分析了高斯束缚势与谐振束缚势的差异, 得出对于较大的量子点和较深的束缚势阱谐振势能够被当作高斯势较好近似的结论, 同时本文还从量子力学对称性出发分析了施主中心量子点系统的能级排序, 一系列分析表明量子点系统的能级特性主要取决于量子点的尺寸、约束势的强度及形状.

- [1] Xie W F 1999 *Chin. Phys. Lett.* **16** 53
- [2] Xie W F 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 53 [解文方 1999 物理学报 **48** 53]
- [3] Xie W F and Chen C Y 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 102 [解文方、陈传誉 1998 物理学报 **47** 102]
- [4] Xie W F and Chen C Y 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 107 [解文方、陈传誉 1998 物理学报 **47** 107]
- [5] Xie W F and Chen C Y 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 478 [解文方、陈传誉 1998 物理学报 **47** 478]
- [6] Lampert M A 1958 *Phys. Rev. Lett.* **1** 450
- [7] Holmes S, Cheng J P, McCombe B D and Schaff W 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2571
- [8] Lok J G S, Geim A K, Maan J C, Marmorkos I, Peeters F M, Mori N, Eaves L, Foster T J, Main P C, Sakai J W and Henini M, 1996 *Phys. Rev. B* **53** 9554
- [9] Jiang Z X, McCombe B D, Zhu J L and Schaff W 1997 *Phys. Rev. B* **56** R1692
- [10] Larsen D M and McCann S Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 3485
- [11] Dzyubenko A B and Sivachenko A Y 1993 *Phys. Rev. B* **48** 14690
- [12] Shi J M, Petters F M and Devreese J T 1995 *Phys. Rev. B* **51** 7714
- [13] Xie W F 1999 *Physics Letters A* **263** 127
- [14] Xie W F 2000 *Solid State Commun.* **115** 417
- [15] Xie W F 2000 *J. Phys. : Condens. Matter* **12** 3849
- [16] Xie W F 2002 *Physica B* **315** 117
- [17] Xie W F and Liu C 2004 *Solid State Commun.* **131** 7
- [18] Jacak L, Hawrylak P and Wojs A 1998 *Quantum Dots* (Springer, Berlin)
- [19] Adamowski J, Sobkowize M, Szafran B and Bednarek S 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4234
- [20] Xie W F 2003 *Solid State Commun.* **127** 401
- [21] Ruan W Y 1996 *J. Math. Phys.* **37** 3760
- [22] Zhu J L, Li Z Q, Yu J Z, Ohno K, Kawazoe Y 1997 *Phys. Rev. B* **55** 15819
- [23] Xie W F 2004 *Commun. Theor. Phys.* **42** 151

Energy spectrum analysis of donor- center quantum dots

Gu Juan Liang Jiu-Qing

(*Institute of Theoretical Physics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China*)

(Received 10 December 2004 ; revised manuscript received 30 March 2005)

Abstract

Within the effective mass approximation, the energy spectra of the donor- center quantum dot system in Gaussian confining potential are calculated by using the method of numerical matrix diagonalization. The results show that the property of the ground and low-lying states of the quantum dot is rather sensitive to the size and the strength of confinement potential.

Keywords : donor- center quantum dots, Gaussian potential, energy spectrum

PACC : 7190, 7320D