第 54 卷 第 5 期 2005 年 5 月
1000-3290/2005/54(05)/1972-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.54,No.5,May,2005

椭圆柱形量子点的能级结构*

侯春风† 郭汝海

(哈尔滨工业大学物理系,哈尔滨 150001)

(2004 年 5 月 11 日收到;2004 年 9 月 17 日收到修改稿)

采用椭圆柱坐标及无限深势阱模型对椭圆柱形量子点进行了研究,给出了计算椭圆柱形量子点中单电子的能级结构和波函数的表达式.

关键词:量子点,人造原子,能级,波函数

PACC:0365,7320D

量子点[1—3]是指只含有少数电子的纳米尺度的金属、半导体及其他物质的人工微结构,在这种微结构中,电子被局限在一个很小的区域内,其运动行为与宏观金属或半导体中的电子行为完全不同,而是类似于原子中的电子,具有明显的量子效应.量子点通常也称为"人造原子",它在很多光电子及微电子器件中具有广阔的应用前景,因此成为近年来的一个热门研究课题.

目前,人们已经研究了球形[4]、方形[5]、圆柱形[6—8]、圆锥形[9]、金字塔形[10—13]以及透镜形[14—19]等多种不同形状的量子点模型.其中,金字塔形和透镜形量子点是近年来人们普遍采用的量子点模型.不久前,Meng 等人[20]制备出了纳米带,其结构接近于柱面透镜形或椭圆柱形.由此可见,对柱面透镜形或椭圆柱形量子点进行理论研究也是有实际意义的.最近,我们提出了一种柱面透镜形量子点模型[21].这里我们将提出一种椭圆柱形量子点模型,在该模型中,电子被限制在一段椭圆柱面围成的区域中.由于在直角坐标系中该椭圆柱形量子点模型的边界条件比较复杂,难以求解,所以我们将采用一种椭圆柱面坐标系对该问题进行求解,给出椭圆柱形量子点中单电子的能级结构和波函数.

这里采用椭圆柱坐标(ξ,η,z),它们与直角坐标(x,y,z)具有如下关系[22]:

$$x = a\cosh\xi\cos\eta,$$
$$y = a\sinh\xi\sin\eta, \tag{1}$$

其中,$\xi\geqslant 0$,$-\pi\leqslant\eta\leqslant\pi$,($x,y$)与($\xi,\eta$)一一对应,$\xi$等于常数表示一个椭圆.在上述椭圆柱坐标系中,Laplace 算子的形式为[22]

$$\nabla^2 = \frac{1}{a^2(\cosh^2\xi-\cos^2\eta)}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{2}$$

在采用了有效质量近似后,我们的问题相当于求解如下 Schrödinger 方程

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{a^2(\cosh^2\xi-\cos^2\eta)}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]+V(\xi,\eta,z)\right\}\psi = E\psi. \tag{3}$$

这里,当 $0\leqslant\xi<b$,$-\pi\leqslant\eta\leqslant\pi$ 及 $0<z<H$ 时,$V=0$,而在其他区域 $V=\infty$;M 为电子的有效质量;a,b 及 H 为三个与量子点的尺寸和形状有关的常量,其中 a 和 b 与量子点的椭圆柱形侧面的尺寸和形状有关,而 H 则代表量子点的高度,它们的数值可根据具体情况来选取.在 $0\leqslant\xi<b$,$-\pi\leqslant\eta\leqslant\pi$ 及 $0<z<H$ 的区域内,方程(3)变为

$$\frac{1}{a^2(\cosh^2\xi-\cos^2\eta)}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2}\right)+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2ME}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{4}$$

上述方程可分离变量,把

$$\psi(\xi,\eta,z) = F(\xi)G(\eta)Z(z) \tag{5}$$

代入方程(4)可得

$$\frac{1}{a^2(\cosh^2\xi-\cos^2\eta)}\left(\frac{F''}{F}+\frac{G''}{G}\right)+\frac{Z''}{Z}+\frac{2ME}{\hbar^2} = 0. \tag{6}$$

* 国家自然科学基金(批准号:90201003)和黑龙江省科学技术计划项目资助的课题.

† E-mail:houchunfeng@hit.edu.cn

方程(6)可拆分为

$$Z'' + \frac{2ME_z}{\hbar^2}Z = 0 \tag{7}$$

和

$$\frac{F''}{F} + \frac{G''}{G} + \frac{2Ma^2(E - E_z)(\cosh^2\xi - \cos^2\eta)}{\hbar^2} = 0, \tag{8}$$

其中 $0 < E_z < E$. 方程(7)满足边界条件 $Z(0) = 0$, $Z(H) = 0$ 的解为

$$Z = \sin\left(\frac{\sqrt{2ME_z}}{\hbar}z\right), \tag{9}$$

其中

$$E_z = \frac{n_3^2\pi^2\hbar^2}{2MH^2}, n_z = 1,2,3,\cdots \tag{10}$$

对方程(8)进行变量分离可得

$$F'' + (4k\cosh^2\xi - \beta)F = 0, \tag{11a}$$

$$G'' + (\beta - 4k\cos^2\eta)G = 0, \tag{11b}$$

其中, $k = Ma^2(E - E_z)/2\hbar^2$. 可以看出方程(11b)为马丢(Mathieu)方程,若令 $\xi = \mathrm{i}\zeta$,则方程(11a)也可变为马丢方程

$$\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}\zeta^2} + [(\beta - 2k) - 2k\cos2\zeta]F = 0, \tag{12a}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}\eta^2} + [(\beta - 2k) - 2k\cos2\eta]G = 0, \tag{12b}$$

上述方程中的 β 为待定参数,可按照文献[22]的 12.6 节和 12.8 节中的方法和有关公式给出. 方程(12a)和(12b)共具有四种周期解,即马丢函数,它们各自的傅里叶展开形式为

$$ce_{2n}(u,k) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r}\cos2ru, \tag{13}$$

$$se_{2n+2}(u,k) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2r+2}\sin[(2r+2)u], \tag{14}$$

$$ce_{2n+1}(u,k) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r+1}\cos[(2r+1)u], \tag{15}$$

$$se_{2n+1}(u,k) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2r+1}\sin[(2r+1)u], \tag{16}$$

其中 $n = 0,1,2,\cdots$; u 代表 ζ 或 η; 马丢函数的傅里叶展开系数 $A_{2r}, A_{2r+1}, B_{2r+1}, B_{2r+2}$ 是 k 的函数,满足如下计算公式[22]:

$$A_{2r+1}^1 = (-1)^r\left[\frac{k^r}{r!(r+1)!4^r} + \frac{rk^{r+1}}{[(r+1)!]^2 4^{r+1}}\frac{k^{r+2}}{(r-1)!(r+2)!4^{r+3}} + \cdots\right]A_1^1, \tag{17}$$

$$A_0^2 = \left(\frac{k}{4} - \frac{5}{3}\cdot\frac{k^3}{4^3} + \frac{1363}{216}\cdot\frac{k^5}{4^5} + \cdots\right)A_2^2, \tag{18}$$

$$A_{2r+2}^2 = (-1)^r\left[\frac{2k^r}{r!(r+2)!4^r} + \frac{r(47r^2 + 222r + 247)k^{r+2}}{18(r+2)!(r+3)!4^{r+2}} + \cdots\right]A_2^2, \tag{19}$$

$$B_{2r+1}^1 = (-1)^r\left[\frac{k^r}{r!(r+1)!4^r} - \frac{rk^{r+1}}{[(r+1)!]^2 4^{r+1}} + \frac{k^{r+2}}{(r-1)!(r+2)!4^{r+3}} + \cdots\right]B_1^1, \tag{20}$$

$$B_{2r+2}^2 = (-1)^r\left[\frac{2k^r}{r!(r+2)!4^r} - \frac{r(r+1)(7r+23)k^{r+2}}{18(r+2)!(r+3)!4^{r+2}} + \cdots\right]B_2^2, \tag{21}$$

$$A_{s-2r}^s = \left[\frac{(s-r-1)!k^r}{r!(s-1)!4^r} + \cdots\right]A_s^s \quad (r > 0, s - 2r \geqslant 0), \tag{22}$$

$$A_{s+2r}^s = \left[(-1)^r\frac{s!k^r}{r!(r+s)!4^r} + \cdots\right]A_s^s \quad (r > 0, s > 0), \tag{23}$$

$$B_{s-2r}^s = \left[\frac{(s-r-1)!k^r}{r!(s-1)!4^r} + \cdots\right]B_s^s \quad (r > 0, s - 2r \geqslant 0), \tag{24}$$

$$B_{s+2r}^s = \left[(-1)^r\frac{s!k^r}{r!(r+s)!4^r} + \cdots\right]B_s^s \quad (r > 0, s > 0), \tag{25}$$

其中 A_{2r}^{2n}, A_{2r+1}^{2n+1}, B_{2r+2}^{2n+2}, B_{2r+1}^{2n+1} 分别代表 $ce_{2n}(u)$, $ce_{2n+1}(u)$, $se_{2n+2}(u)$ 和 $se_{2n+1}(u)$ 的傅里叶展开系数,在无特殊注明的情况下 $r \geqslant 1$. 利用(17)—(25)式及文献[23]中的递推公式即可求出马丢函数(13)—(16)式的傅里叶展开系数.

根据文献[23]可知,当 k 小的时候,即当能量 $E - E_z$ 较小时,方程(12a)和(12b)的解可具体地表示为

$$ce_0(u,k)=2^{-1/2}\left[1-\frac{k}{2}\cos 2u+k^2\left(\frac{\cos 4u}{32}-\frac{1}{16}\right)-k^3\left(\frac{\cos 6u}{1152}-\frac{11\cos 2u}{128}\right)+\cdots\right],\tag{26}$$

$$ce_1(u,k)=\cos u-\frac{k}{8}\cos 3u+k^2\left(\frac{\cos 5u}{192}-\frac{\cos 3u}{64}-\frac{\cos u}{128}\right)-k^3\left(\frac{\cos 7u}{9216}-\frac{\cos 5u}{1152}-\frac{\cos 3u}{3072}+\frac{\cos u}{512}\right)+\cdots\tag{27}$$

$$se_1(u,k)=\sin u-\frac{k}{8}\sin 3u+k^2\left(\frac{\sin 5u}{192}+\frac{\sin 3u}{64}-\frac{\sin u}{128}\right)-k^3\left(\frac{\sin 7u}{9216}+\frac{\sin 5u}{1152}-\frac{\sin 3u}{3072}-\frac{\sin u}{512}\right)+\cdots\tag{28}$$

$$ce_2(u,k)=\cos 2u-k\left(\frac{\cos 4u}{12}-\frac{1}{4}\right)+k^2\left(\frac{\cos 6u}{384}-\frac{19\cos 2u}{288}\right)+\cdots\tag{29}$$

$$se_2(u,k)=\sin 2u-k\frac{\sin 4u}{12}+k^2\left(\frac{\sin 6u}{384}-\frac{\sin 2u}{288}\right)+\cdots\tag{30}$$

对于 $m\geqslant 3$，

$$ce_m(u,k)=\cos mu-k\left[\frac{\cos(m+2)u}{4(m+1)}-\frac{\cos(m-2)u}{4(m-1)}\right]$$
$$+k^2\left[\frac{\cos(m+4)u}{32(m+1)(m+2)}+\frac{\cos(m-4)u}{32(m-1)(m-2)}-\frac{2(m^2+1)\cos mu}{32(m^2-1)^2}\right]+\cdots\tag{31}$$

$$se_m(u,k)=\sin mu-k\left[\frac{\sin(m+2)u}{4(m+1)}-\frac{\sin(m-2)u}{4(m-1)}\right]$$
$$+k^2\left[\frac{\sin(m+4)u}{32(m+1)(m+2)}+\frac{\sin(m-4)u}{32(m-1)(m-2)}-\frac{2(m^2+1)\sin mu}{32(m^2-1)^2}\right]+\cdots\tag{32}$$

用 η 代替(26)—(32)式中的 u，可以得到 $G(\eta)$ 而用 $\zeta=-\mathrm{i}\xi$ 代替(26)—(32)式中的 u，即用 $\cosh m\zeta$ 代替 $\cos mu$、用 $-\mathrm{i}\sinh m\xi$ 代替 $\sin mu$，就可以得出 $F(\xi)$. 再由(5)式和(9)式即可得出椭圆柱形量子点中单电子的波函数 $\psi(\xi,\eta,z)$. 由边界条件 $\psi|_{\xi=b}=0$ 即 $F(\xi=b)=0$，可知

$$1-\frac{k}{2}\cosh 2b+k^2\left(\frac{\cosh 4b}{32}-\frac{1}{16}\right)-k^3\left(\frac{\cosh 6b}{1152}-\frac{11\cosh 2b}{128}\right)=0,\tag{33}$$

$$\cosh b-\frac{k}{8}\cosh 3b+k^2\left(\frac{\cosh 5b}{192}-\frac{\cosh 3b}{64}-\frac{\cosh b}{128}\right)-k^3\left(\frac{\cosh 7b}{9216}-\frac{\cosh 5b}{1152}-\frac{\cosh 3b}{3072}+\frac{\cosh b}{512}\right)=0,\tag{34}$$

$$\sinh b-\frac{k}{8}\sinh 3b+k^2\left(\frac{\sinh 5b}{192}+\frac{\sinh 3b}{64}-\frac{\sinh b}{128}\right)-k^3\left(\frac{\sinh 7b}{9216}+\frac{\sinh 5b}{1152}-\frac{\sinh 3b}{3072}-\frac{\sinh b}{512}\right)=0,\tag{35}$$

$$\cosh 2b-k\left(\frac{\cosh 4b}{12}-\frac{1}{4}\right)+k^2\left(\frac{\cosh 6b}{384}-\frac{19\cosh 2b}{288}\right)=0,\tag{36}$$

$$\sinh 2b-k\frac{\sinh 4b}{12}+k^2\left(\frac{\sinh 6b}{384}-\frac{\sinh 2b}{288}\right)=0,\tag{37}$$

以及

$$\cosh mb-k\left[\frac{\cosh(m+2)b}{4(m+1)}-\frac{\cosh(m-2)b}{4(m-1)}\right]$$
$$+k^2\left[\frac{\cosh(m+4)b}{32(m+1)(m+2)}+\frac{\cosh(m-4)b}{32(m-1)(m-2)}-\frac{2(m^2+1)\cosh mb}{32(m^2-1)^2}\right]=0,\tag{38}$$

$$\sinh mb-k\left[\frac{\sinh(m+2)b}{4(m+1)}-\frac{\sinh(m-2)b}{4(m-1)}\right]$$
$$+k^2\left[\frac{\sinh(m+4)b}{32(m+1)(m+2)}+\frac{\sinh(m-4)b}{32(m-1)(m-2)}-\frac{2(m^2+1)\sinh mb}{32(m^2-1)^2}\right]=0,\tag{39}$$

其中 $m\geqslant 3$. 根据(33)—(39)式，通过求解代数方程或数值计算可给出不同状态下的 k 值，由此即可给出椭圆柱形量子点中单电子的能级 $E_{\xi\eta}=E-E_z$，进而可给出单电子的总能量 E.

表 1 椭圆柱形量子点的能级(以 $2\hbar^2/Ma^2$ 为单位)

b	$E_{\xi\eta}=E-E_z$					
	E_0^c	E_1^c	E_2^c	E_1^s	E_2^s	E_3^s
0.1	—	4.4269	5.4210	—	7.4273	6.9978
0.2	—	4.3055	5.2009	—	7.4065	6.8954
0.3	—	4.1131	4.8789	—	7.4971	6.7402
0.4	—	3.8624	4.5035	—	—	6.5584
0.5	—	3.5674	4.1177	—	—	6.3988
0.6	—	3.2408	3.7532	4.0833	—	6.3826
0.7	—	2.8933	3.4323	3.1825	—	7.5287
0.8	—	2.5334 4.9535	3.1765	2.5602	—	—
0.9	—	2.1728 4.0370	3.0373	2.0896	—	—
1.0	—	1.8277 3.4526	—	1.7165	—	—
1.1	0.7468 1.0003	1.5156 3.1046	—	1.4137	—	—
1.2	0.5620 1.0672	1.2460 3.0497	—	1.1650	—	—
1.3	0.4453 1.1071	1.0198	—	0.9599	—	—
1.4	0.3582 1.3229	0.8331	—	0.7904	—	—
1.5	0.2902	0.6801	—	0.6503	—	—
1.6	0.2360	0.5551	—	0.5347	—	—
1.7	0.1924	0.4532	—	0.4393	—	—
1.8	0.1571	0.3702	—	0.3608	—	—
1.9	0.1284	0.3024	—	0.2961	—	—
2.0	0.1050	0.2472	—	0.2429	—	—

表 1 给出了参数 b 取不同值(相当于量子点的椭圆形断面的长短轴之比 $\coth b$ 取不同值)的情况下,椭圆柱形量子点中前几级单电子波函数所对应的能级 $E_{\xi\eta}=E-E_z$.其中,E_m^c 与 $ce_m(u,k)$ 相对应,而 E_m^s 与 $se_m(u,k)$ 相对应.为了计算方便,表 1 中的能量单位取为 $\frac{2\hbar^2}{Ma^2}$,在表 1 中略去了能级方程的复数解以及无物理意义的解.由表 1 可见,当 b 较小也就是当椭圆柱形量子点较扁时,与(26)和(28)式相对应的态不存在;而当 b 较大也就是当椭圆柱形量子点较圆时,与(29),(30)和(32)式相对应的态不存在.此外,由表 1 还可知,在有些情况下还存在着能级简并现象.

利用表 1 代入具体的材料参数即可得出所需要的单电子能级的具体值.例如,对于 Ge/Si 材料的量子点,电子的有效质量为 $0.98m_e$(其中 m_e 为自由电子的质量)[12],取椭圆柱形量子点的尺寸为 $a=5$nm,$H=10$nm,则当 $b=0.8$ 时(相当于量子点的椭圆形断面的长短轴之比为 3/2 的情况),与(29)或(36)式相对应的单电子能级 $E_2^c=\frac{3.1765\times2\hbar^2}{0.98m_e a^2}=0.0198$eV.如果单电子的 z 分量波函数处于 $n_z=1$ 的态,则有 $E_z=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\times0.98m_e H^2}=0.0038$eV.在上述情况下,椭圆柱形量子点中单电子的总能量为 $E=E_2^c+E_z=0.0236$eV.

综上所述,这里提出了一种椭圆柱形量子点模型,采用一种椭圆柱面坐标系对该模型进行了求解,给出了椭圆柱形量子点中单电子的能级所满足的表达式及相应的波函数,并给出了前几级能级的数值计算结果.

[1] Kastner M A 1993 *Phys. Today* **46** 24
[2] Bimberg D, Grundmann M and Ledentsov N N 1998 *Quantum Dot Hetersructures* (New York: Wiely)
[3] Reimann S M and Manninen M 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 1283
[4] Inoshita T, Ohnishi S and Oshiyama A 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 2560
[5] Lew Yan, Voon L C and Willatzen M 1995 *Semicond. Sci. Technol.* **10** 416
[6] Le Goff S and Stébé B 1993 *Phys. Rev.* B **47** 1383
[7] Tarucha S, Austing D G, Honda T, van der Hage R J and Kouwenhoven L P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3613
[8] Kouwenhoven L P, Oosterkamp T H, Danesastro M W S, Eto M, Austing D G, Honda T and Tarucha S 1997 *Science* **278** 1784
[9] Marzin J Y and Bastard G 1994 *Solid State Commun.* **92** 437
[10] Ruvimov S *et al* 1995 *Phys. Rev.* B **51** 14766
[11] Pryor C 1998 *Phys. Rev.* B **57** 7190
[12] Kim J Y and Seok J H 2002 *Mat. Sci. Eng.* B **89** 176
[13] Sheng W and Leburton J P 2003 *Phys. Rev.* B **67** 125308
[14] Fry P W *et al* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 733
[15] Heidemeyer H, Denker U, Müller C and Schmidt O G 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 196103
[16] Pei Q X, Lu C and Wang Y Y 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 1487
[17] Hou C F, Guo R H, Zhou Z X, Sun X D 2004 *Laser Phys.* **14** 1507
[18] Lew Yan Voon L C, Willatzen M 2002 *J. Phys*: *Condens. Matter* **14** 13667
[19] Chang J F, Zeng X H, Zhou P X and Bi Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 978 [常加峰、曾祥华、周朋霞、毕 桥 2004 物理学报 **53** 978]

[20] Meng X M, Jiang Y, Liu J, Lee C S, Bello I, Lee S T 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 2244

[21] Hou C F, Zhou Z X, Guo R H and Sun X D, *Physica* E (submitted)

[22] Wang Z X and Guo D R 2000 *Introduction to Special Function* (Beijing: Peking University Press) p 601 (in Chinese) [王竹溪、郭敦仁 2000 特殊函数概论(北京:北京大学出版社)第 601 页]

[23] Abramowitz M and Stegun I A 1964 *Handbook of Mathematical Functions* (Washington D. C: U. S. Government Printing Office) p 721

Energy structures of the elliptic cylindrical quantum dots *

Hou Chun-Feng Guo Ru-Hai

(*Department of Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin* 150001, *China*)

(Received 11 May 2004; revised manuscript received 17 September 2004)

Abstract

We have investigated the elliptic cylindrical quantum dot by adopting elliptic cylindrical coordinates and infinite-potential model, and presented the expressions for calculating the energy structures and wave-functions of the single electron in the elliptic cylindrical quantum dot.

Keywords: quantum dot, artificial atom, energy level, wave function

PACC: 0365, 7320D

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 90201003) and the Science & Technology Program of Heilongjiang Province.