

量子点中浅施主的能谱结构

陈曦 朱嘉麟

清华大学现代应用物理系, 北京 100084

1993 年 4 月 26 日收到

在有效质量近似下,使用线性变分方法计算了处于 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 球形量子点中不同位置的浅施主杂质的能谱结构,讨论了能级的简并度和不同情况下的能级序,扩展了文献[10]中所得到的结果. 计算结果表明电子结构明显地依赖于量子点的半径和杂质离子所处的位置. 计算结果还说明选择合适的基函数对于讨论量子点中问题的重要性.

PACC: 7155; 7340L

一、引言

在过去 10 多年里,由于晶体生长技术的发展,二维量子阱、一维量子线和零维量子点等低维量子结构得到了广泛的研究和应用,不少实验室进行了大量的工作^[1-3]. 这些低维系统的光学、电子学等性质在理论上和实验上越来越引起人们的关注. 量子阱和量子线中的激子态和杂质态可对器件的光电和输运性质有重要的影响. 这方面已经有不少的理论工作^[4-7]. 量子点通过改变其线度能够容易地得到一些特殊的性质,引起了人们的兴趣. 当线度减小时,空间上对电子的约束会增强,导致电子的动能增加,而电子与杂质之间的库仑作用的有效强度也会发生变化,因此处于量子点中电子对杂质的结合能会发生显著的改变. 这种变化不仅与量子点的尺寸有关,也依赖于杂质在量子点中所处的几何位置. 关于位于球形量子点中心类氢施主杂质的情况,已经有了一些理论工作^[6-11],并求出了严格解^[9,10]. 本文将在文献[10]严格解的基础上,对施主杂质离子处于任意位置的一般情形进行变分处理,给出电子能级结构并将有关的几种情况进行比较讨论,阐明杂质位置对不同半径的量子点中的电子结构以及杂质态结合能的影响.

二、物理模型与计算方法

计算在有效质量近似下进行. 已经知道在 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子阱的研究中,当阱宽足够大时,有效质量近似会给出很好的计算结果,其极限宽度约为 $30 \text{ \AA}$. 因此对于足够大(线度大于 $30 \text{ \AA}$)的 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子点,有效质量近似也应该适用. 以下的计算所考虑的量子点的直径都在这个临界尺寸以上. 应该指出,当介电常数从量子点到周围介质发生很大的不连续变化时,介质极化效应和镜像电荷修正将是重要的,但这种效应对我们所讨论的 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子点来说很小,因此可以略去. 另外,如果通过

有效质量方程求出的球形量子点中类氢施主杂质态的结合能有很大的增加,以致可以与半导体的能隙相比拟,则有效质量方程就不再适用。但对于本文所讨论的问题,GaAs 能隙为 1.4eV,有效能量单位 $Ry^* = 5.3meV$,从后面求出的结果可以看出能隙比结合能还要大很多,因此可以用有效质量方程讨论问题。

在文献[10]中已经对位于球形量子点中心的类氢施主杂质的有效质量方程的精确解进行了详细的讨论。为了叙述方便,现将该文的主要公式列于附录 A 中。下面讨论杂质处于一般位置的情形。

考虑半径为 R_0 的球形量子点,以球心为原点建立球坐标系, (r, θ, φ) 为球极坐标。在 $r = R_0$ 处由于带边不连续性导致的势能为

$$V(r) = \begin{cases} V_0, & r > R_0; \\ 0, & r < R_0, \end{cases} \quad (1)$$

V_0 可由 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 中的铝浓度 x 定出。

根据有效质量理论,量子点中的施主杂质的无量纲形式的哈密顿量为

$$H = -\nabla^2 - \frac{2w}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}|} + V(r), \quad (2)$$

其中能量单位为有效 Rydberg: Ry^* , 长度单位为有效玻尔半径 a^* , 对于类氢施主杂质离子 $w = 1$, $\mathbf{a}$ 为杂质离子所处位置的矢径。不失一般性,让 $\mathbf{a}$ 指向正 z 轴方向,问题归结为求解薛定谔方程:

$$H\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi). \quad (3)$$

由于系统具有绕 z 轴的转动对称性, H 的本征态可以用磁量子数 m 来标记。

为了使用线性变分方法^[12],将哈密顿量写为

$$H = H_0 + H', \quad (4)$$

$$H_0 = -\nabla^2 - \frac{2w}{r} + V(r), \quad (5)$$

$$H' = \frac{2w}{r} - \frac{2w}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}|}. \quad (6)$$

将附录 A 中 H_0 的精确解作为线性变分基矢。设 H_0 的第 i 个正交归一本征函数为 $\Psi_i^{(0)}$, 其主量子数、角量子数和磁量子数分别为 n_i , l_i 和 m_i , 本征能量 $E_i^{(0)}$, $E_i^{(0)}$ 只与 n_i, l_i 有关。变分波函数为

$$\Psi_m = \sum_{i=1}^f C_i^{(m)} \Psi_i^{(0)}. \quad (7)$$

在所考虑的问题中,磁量子数 m 为好量子数,所以上式求和中只需包含 $m_1 = m_2 = \dots = m_f = m$ 及 n, l 不同的各项。

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (8)$$

通过变分,

$$\delta E / \delta C_i = 0, \quad (9)$$

得到久期方程:

$$\sum_i [H'_{ij} - (E - E_i^{(0)})\delta_{ij}]C_i = 0 \quad j = 1, 2, \dots, f, \quad (10)$$

其中

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j, \end{cases} \quad (11)$$

$$H'_{ij} = \langle \Psi_i^{(0)} | H' | \Psi_j^{(0)} \rangle, \quad (12)$$

且 $m_i = m_j = m$.

通过选择一系列合适的 $\Psi^{(0)}$, (10)式能够求出具有磁量子数 m 的一系列能级. 从物理学上考虑当杂质由中心处逐渐偏离时, 能级 $E_{nl}^{(0)}$ 的 $2l+1$ 重简并被部分消除. 为了方便, 将由(10)式得到的一系列能级用 E_{nlm} 标记. 其中 m 为好量子数. 虽当 $a \neq 0$ 时, l 不再为好量子数, 但可用来说明该能级是由 $a = 0$ 时的 $E_{nl}^{(0)}$ 分裂得来的. 对于能级 E_{nlm} , 当 $m = 0$ 时, 没有简并; 当 $m \neq 0$ 时, $E_{nlm} = E_{n, l-m}$ 为两重简并, 因此 $E_{nl}^{(0)}$ 分裂为由 E_{nlm} 标记的 $l+1$ 条能级.

下面具体考虑矩阵元 H'_{ij} 的计算. $\Psi_i^{(0)}$ 可写为

$$\Psi_i^{(0)}(r, \theta, \varphi) = R_{n, l_i}(r) Y_{l_i, m_i}(=m)(\theta, \varphi), \quad (13)$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 和 $R_{nl}(r)$ 分别为球谐函数和径向波函数, 详见附录 A.

根据公式

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos \Theta), \quad (14)$$

$r_{<} = \min(r, r')$, $r_{>} = \max(r, r')$, Θ 为 $\mathbf{r}$ 与 $\mathbf{r}'$ 之间的夹角. 由于 $\mathbf{a}$ 指向正 z 轴方向, $\mathbf{r}$ 与 $\mathbf{a}$ 之间的夹角即为 $\mathbf{r}$ 的球极坐标中的 θ , 所以有

$$\begin{aligned} H'_{ij} &= \int \Psi_i^{(0)*} \left(\frac{2\omega}{r} - \frac{2\omega}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}|} \right) \Psi_j^{(0)} d\tau \\ &= 2\omega \int_0^{\infty} R_{n, l_i} R_{n, l_j} r dr \delta_{l_i, l_j} \\ &\quad - 2\omega \sum_{l=|l_i-l_j|}^{l_i+l_j} (-1)^m [(2l_i+1)(2l_j+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} l_i & l_j & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l_j & l \\ -m & m & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad \times \left[\frac{1}{a^{l+1}} \int_0^a R_{n, l_i} R_{n, l_j} r^{l+2} dr + a^l \int_a^{\infty} R_{n, l_i} R_{n, l_j} \frac{1}{r^{l-1}} dr \right], \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ 为 Wigner 3- j 符号^[13]. 上式的详细推导过程见附录 B.

这样, 在久期方程(10)中各个量定出之后, 进行数值计算, 即可给出系统的能级结构. 对于具有偏离中心的类氢施主杂质的情形, 能级由 $E_{nlm}(\omega = 1)$ 给出. 为了计算结合能, 要求出 $E_{nl}(\omega = 0)$. $E_{nl}(\omega = 0)$ 是当不存在杂质离子时的电子能级, 也即有限深球形势阱中的电子能级. $E_{nl}(\omega = 0)$ 的计算公式能够解析地由下式决定^[10]:

$$k_0 + K_0 \tan(k_0 R_0) = 0 \quad \text{当 } l = 0, \quad (16a)$$

$$\begin{aligned} i k_l h_l (i K_l R_0) j_{l-1}(k_l R_0) + K_l h_{l-1} (i K_l R_0) j_l(k_l R_0) \\ = 0 \quad \text{当 } l \geq 1, \end{aligned} \quad (16b)$$

$$k_l = E^{1/2}, K_l = [V_0 - E]^{1/2}, \quad (17)$$

j_l 和 h_l 为 l 阶 Bessel 函数和第一类球 Hankel 函数。一旦 $E_{nlm}(\omega = 1)$ 和 $E_{nl}(\omega = 0)$ 定出, 球形量子点偏心类氢施主杂质的结合能为

$$E_B(n, l, m) = E_{nl}(\omega = 0) - E_{nlm}(\omega = 1). \quad (18)$$

三、计算结果与讨论

本工作中的线性变分的基函数采用 $\omega = 1$, 即在量子点中心有一单位电荷的施主杂质离子时的电子波函数, 这种基的选择对于计算杂质离子偏离中心不远, R_0 足够大时的低态电子能级是合适的, 相对于采用 $\omega = 0$ 的基, 能够给出较好的结果。因而文献[10]给出了计算量子点中与杂质态有关的一系列问题的合适的基底。对于 a 较大或高激发态的情形, 选用 $\omega = 0$ 和 $\omega = 1$ 两种基得出极为接近的结果。

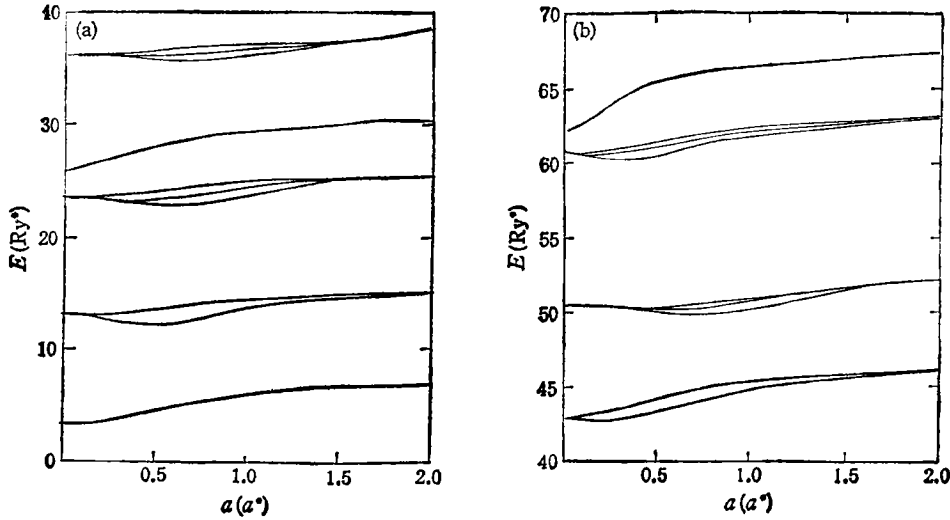


图 1 $V_0 = 80\text{Ry}^*$, $R_0 = 1a^*$ 的量子点的类氢施主杂质态电子结构 (a) 用 $nl(s, p, d, \dots)|m|$ 标记的能级序由下至上依次为 $1s_0, 2p_0, 2p_1, 3d_0, 3d_1, 3d_2, 2s_0, 4f_0, 4f_1, 4f_2$; (b) 能级序依次为 $3p_0, 3p_1, 5g_0, 5g_1, 5g_2, 4d_0, 4d_1, 4d_2, 3s_0$

图 1(a) 和 (b) 示出 $V_0 = 80\text{Ry}^*$, $R_0 = 1a^*$ 的球形量子点中存在偏心杂质库仑吸引势时相应于磁量子数 $m = 0, \pm 1, \pm 2$ 的电子能级。表 1 示出相应的杂质位于阱内时的各能级的结合能 $E_B(n, l, m)$ 的部分计算数据。由 n, l, m 来标记能级, $E(\omega = 0)$ 为不存在杂质离子时的电子能级, a 为杂质离子所处位置到球心的距离。图 2(a) 和 (b) 和表 2 中示出 $R_0 = 3a^*$ 的相应结果。

从表和图中都能明显地看出当杂质离子偏离中心时, 电子能级的分裂。s 态由于 $l = 0$, 没有简并, 因而不会出现分裂; p 态 ($l = 1$) 分裂成两条能级, 磁量子数分别为零和 ± 1 , 其中 $m = \pm 1$ 的两个态简并; d 态 ($l = 2$) 分裂成三条能级……所有的能级在 a 趋于零时趋于 $E_{nl}(\omega = 1)$ 的精确解^[10], 而当 a 趋于 ∞ 时, 由同一 n, l 分裂开的 $l + 1$ 条能级又逐渐接近, 并一起趋于 $E_{nl}(\omega = 0)$ 。这分别对应于杂质离子位于量子点中心和移

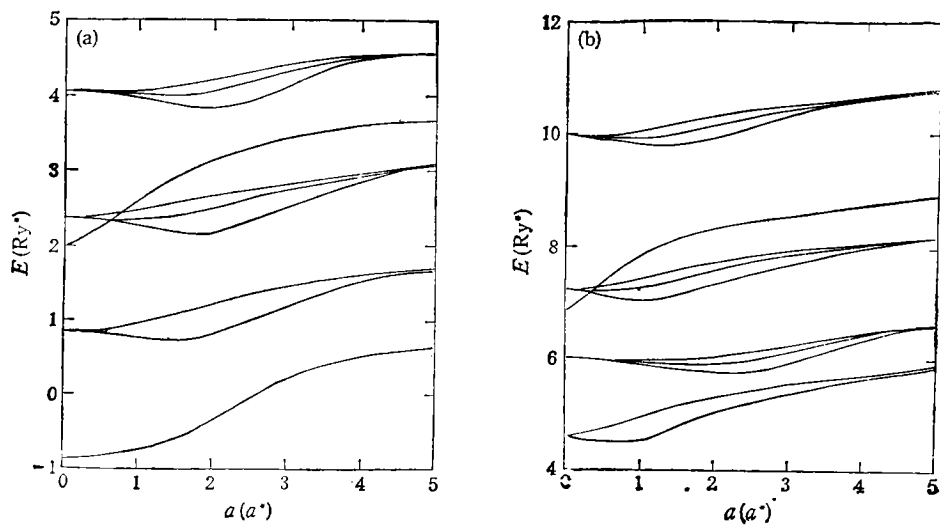


图2 $V_0 = 80\text{Ry}^*$, $R_0 = 3a^*$ 的量子点的类氢施主杂质态电子结构 (a) 在 $a = 0$ 点附近能级由下至上依次为 $1s_0, 2p_0, 2p_1, 2s_0, 3d_0, 3d_1, 3d_2, 4f_0, 4f_1, 4f_2$; (b) 在 $a = 0$ 点附近能级序依次为 $3p_0, 3p_1, 5g_0, 5g_1, 5g_2, 3s_0, 4d_0, 4d_1, 4d_2, 5f_0, 5f_1, 5f_2$

到无限远处两种情形。在 a 趋于 ∞ 时, 电子处于一个无库仑势的球形量子点中, 因此能级由(16a)和(16b)式定出。以上计算结果与理论上的定性分析完全相符。

表1 $V_0 = 80\text{Ry}^*$, $a = 1a^*$ 时的电子结合能

$\begin{matrix} a \\ n l m \end{matrix}$	100	210	211	320	321	322	200	430	431	432
0	4.620	3.350	3.350	2.923	2.923	2.923	5.597	2.693	2.693	2.693
0.5	3.715	3.842	2.774	3.492	2.903	2.469	3.156	3.198	2.867	2.554
$E(\omega = 0)$	7.957	16.225		26.593			31.425	38.919		

$\begin{matrix} a \\ n l m \end{matrix}$	310	311	540	541	542	420	421	422	300
0	4.115	4.115	2.541	2.541	2.541	3.465	3.465	3.465	5.771
0.5	3.787	2.826	2.953	2.772	2.559	3.780	3.028	2.588	2.681
$E(\omega = 0)$	47.016		53.078			64.207			68.070

$R_0 = 1a^*$ 时, 在 $a = 0$ 和 ∞ 两种极端情形下, 电子的能级序均为 $1s, 2p, 3d, 2s, 4f, 3p, 5g, 4d, 3s$; 而 $R_0 = 3a^*$ 时, $a = 0$ 和 ∞ 两种情形下能级序不相同, 分别为 $1s, 2p, 2s, 3d, 4f, 3p, 5g, 3s, 4d, \dots$ 和 $1s, 2p, 3d, 2s, 4f, 3p, 5g, 4d, 3s, \dots$ 。在 $R_0 = 1a^*$ 时, 球形量子点的限制势 V_0 占有主导地位, 库仑势的效果并不明显, 库仑势所处的位置的变化也对能级结构的影响较小。而当 $R_0 = 3a^*$ 时, 库仑势与限制势有较强烈的耦合。对于 $1s$ 态能量, 当 $a = 0$ 时已经相当接近于三维氢原子的基态能 1Ry^* , 库仑势起主导作用。随着 a 的增大, $1s$ 态能量单调增加。当 $a = 2.5a^*$ (已经接近于量子点边缘) 时, 能量约为零, 限制势 V_0 占有主导地位。而后随着 a 的进一步增大, 能量又逐渐接近于球形

表 2 $V_0 = 80\text{Ry}^*$, $a = 3a^*$ 时的电子结合能

$a \backslash n l m $	100	210	211	200	320	321	322	430	431	432
0	1.891	1.237	1.237	2.085	1.066	1.066	1.066	0.982	0.982	0.982
1.5	1.628	1.367	1.023	1.147	1.254	1.057	0.888	1.164	1.045	0.923
$E(\omega = 0)$	1.019	2.085		4.074	3.429			5.040		

$a \backslash n l m $	310	311	540	541	542	300	420	421	422	530	531	532
0	1.540	1.540	0.930	0.930	0.930	2.311	1.322	1.322	1.322	1.201	1.201	1.201
1.5	1.366	1.020	1.095	1.019	0.932	1.021	1.439	1.130	0.951	1.388	1.166	1.008
$E(\omega = 0)$	6.157		6.909			9.160	8.532			11.189		

量子点 ($V_0 = 80\text{Ry}^*$, $a = 3a^*$) 中单电子的基态能 1.019Ry^* 。图 2 中非常明显的特征是 s 态与 d 态两组能级的交叉, 从而导致了能级序的改变。其中 $2s$ 与 $3d$ 态的交叉发生在 $a = 0.6 - 0.8a^*$, $3s$ 与 $4d$ 态的交叉发生在 $a = 0.4a^*$ 左右。这是库仑势与限制势相互竞争的结果, 在 $R_0 = 3a^*$ 时, 这种竞争表现得比较明显。此外两种势对能级的影响还取决于与该能级对应的波函数的形状。在 $s, p, d, \dots$ 各态中仅有 s 态的波函数在 $r = 0$ 处不为零, 所以处于中心附近的库仑势会对 s 态造成很大影响, 而对其他态这种影响则小些。在图 2 中能够看出 s 态能级随 a 的变化要比其他态更为显著, 这种特性与上面就波函数所作的分析相符。在微结构中普遍存在着所谓量子尺寸效应, 这种效应的存在主要来源于当体系的线度小到一定程度后, 在一定范围内, 电子的波函数敏感地依赖于某些因素。如在上所考虑的问题中, 改变 R_0 就会使得电子能级结构发生显著变化。此外计算结果还表明电子所受的杂质离子与量子点的合成势的形状对电子能级有明显的影响, 比如改变杂质离子到球心的距离会产生能级换序, 这种换序预计可能会对量子点的某些性质产生影响。

考察 $R_0 = 1a^*$ 和 $3a^*$ 的电子结合能。在 $a = 0$ 时, 可以发现对具有相同角量子数 l 的态, 结合能随着主量子数 n 的增加而增加, 如 $E_B(1s) < E_B(2s) < E_B(3s)$, $E_B(2p) < E_B(3p) \dots$ 。这是由于限制势 V_0 的存在造成的。若 $V_0 = 0$, 对于孤立的氢原子, 结合能随 n 增加而减小。当存在一定的限制势 V_0 , 且 R_0 取值在合适的范围内时, 电子云主要被限制在势阱中。由于有限制势 V_0 的存在, 随着 $\omega = 0$ 时的电子波函数径向部分 $R_{nl}(r)$ 的节点数 $(n - l - 1)$ 的增加, $|R_{nl}(r)|^2$ 的极大值位置逐渐靠近原点, 因此受到位于原点的库仑势的影响也逐渐增大, 导致结合能随 n 的增加而增加。这种现象是量子点中电子能级结构的一个显著特征。

当 a 很大时各态的结合能变得非常接近。例如通过计算得到当 $R_0 = 1a^*$, $a = 2a^*$ 时, 各态的结合能 E_B 都处在 $0.9 - 1.05\text{Ry}^*$ 这个范围内; 而对于 $R_0 = 3a^*$, $a = 7a^*$ 的情形, $E_B = 0.27 - 0.29\text{Ry}^*$ 。这是由于当 a 较大 ($a > R_0$) 时, 电子与杂质离子相互作用可以近似地看作是位于量子点中心和位于杂质离子处的两个点电荷之间的库仑引力, 因而结合能在 a 趋于 ∞ 时的渐近值为 $2/a$ (单位为 Rydberg^*)。在 $a = 2a^*$ 和 $7a^*$ 时,

该渐近值分别为 1Ry^* 和 0.286Ry^* , 这与上面的计算数据相符。

对于 $0 < a < \infty$, 结合能有以下特点: 首先对具有相同 l, n 的态和一定的 a , 结合能随 $|m|$ 的增加而减小; 其次, 在具有相同 l, n 的态中, $|m| = l$ 的态的结合能随 a 增大而单调下降, 而其他 l 个能级都在某个 a 处有一结合能的极大值, 且该极大值点的结合能随 $|m|$ 的增加而减小。一般地使得电子受到库仑势影响最大的杂质离子的位置不在中心, 当杂质离子偏离了中心一段距离后, 电子的结合能会变得更大。这也可以说是系统对称性的降低导致了能量降低(类似于 Jahn-Teller 效应^[14])。结合能的这些特点也能够从对波函数的径向分布和角分布的分析中得到解释。

四、结 论

通过选择一组合适的基, 使用线性变分方法, 本文较详细地计算了类氢施主杂质处于任意位置情况下的球形量子点中的电子能级结构。就量子点半径、杂质离子位置等因素对电子能级的影响进行了讨论。由于杂质离子不再位于量子点中心, 使得体系对称性降低, 导致了关于 m 的 $2l + 1$ 重简并被部分消除, 分裂为 $l + 1$ 条能级。由于量子点的限制势 V_0 与杂质离子库仑势相互竞争, 使得对于不同的量子点半径和不同的杂质离子到球心的距离 a , 电子呈现出不同的能级序, 因而给出了量子尺寸效应的一个例证, 并预计会对量子点的性质产生影响。限制势 V_0 的存在所产生的一个直接后果是对于相同 l 不同 n 的态, 电子结合能随 n 增加而增加, 这与从波函数出发所进行的定性分析相符。计算结果表明对于 $|m| \neq l$ 的态, 使结合能取得最大值的杂质离子的位置不在球心。电子结合能与 a 的关系也能够根据波函数的特点加以说明。

附 录 A

根据文献[10], 哈密顿量的形式为

$$H = -\nabla^2 - \frac{2\omega}{r} + V(r). \quad (\text{A1})$$

Schrödinger 方程为

$$H\Psi = E\Psi. \quad (\text{A2})$$

对于球对称势, 角量子数和磁量子数均为好量子数, 波函数可以写为

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (\text{A3})$$

Y_{lm} 为球谐函数, $R_{nl}(r)$ 为径向波函数, 满足方程:

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} R_l + 2r \frac{d}{dr} R_l + \{[E - V(r)]r^2 - l(l+1) + 2\omega r\} R_l = 0. \quad (\text{A4})$$

上式可以得到级数解, 形式见文献[10].

以上给出了线性变分的基函数.

附 录 B

由(14)式得

$$H'_{ij} = 2\omega \int_0^\infty R_{n_i l_i} R_{n_j l_j} r dr \delta l_i l_j - 2\omega \sum_{l=0}^\infty \left[\int Y_{l, m}^*(\theta, \varphi) Y_{l, m}(\theta, \varphi) P_l(\cos \theta) d\Omega \right] \\ \cdot \left[\frac{1}{a^{l+1}} \int_0^a R_{n_i l_i} R_{n_j l_j} r^{l+2} dr + a^l \int_a^\infty R_{n_i l_i} R_{n_j l_j} \frac{1}{r^{l+1}} dr \right], \quad (B1)$$

其中 $P_l(\cos \theta)$ 为 l 阶 Legendre 函数, 球谐函数 $Y_{l, m}$ 采用文献[15]的定义.

由文献[13]知:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2} Y_{l_3 m_3} \sin \theta d\theta d\varphi = \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, \quad (B2)$$

$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ 为 Wigner 3-j 符号. 根据 $Y_{l, -m} = (-1)^m Y_{l, m}^*$ 和 $Y_{l, m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$, 得

$$\int Y_{l, m}^* Y_{l, m} P_l(\cos \theta) d\Omega = (-1)^m [(2l+1)(2l+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} l & l & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l & l \\ -m & m & 0 \end{pmatrix}. \quad (B3)$$

Wigner 3-j 符号可写成如下便于计算的形式:

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{l_1-l_2-m_3} \left[\frac{(l_1+l_2-l_3)!(l_2+l_3-l_1)!(l_3+l_1-l_2)!}{(l_1+l_2+l_3+1)!} \right]^{1/2} \\ \times \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa} [(l_1+m_1)!(l_1-m_1)!(l_2+m_2)!(l_2-m_2)!(l_3+m_3)!(l_3-m_3)!]^{1/2} / \\ \kappa!(l_1+l_2-l_3-\kappa)!(l_1-m_1-\kappa)!(l_2+m_2-\kappa)!(l_3-l_2+m_1+\kappa)!(l_3-l_1 \\ -m_2+\kappa)! \}. \quad (B4)$$

l_1, l_2, l_3 和 m_1, m_2, m_3 满足下述条件时 3-j 符号不为零:

$$l_1 + l_2 \geq l_3, \quad l_2 + l_3 \geq l_1, \quad l_3 + l_1 \geq l_2$$

和

$$l_1 \geq |m_1|, \quad l_2 \geq |m_2|, \quad l_3 \geq |m_3|, \quad m_1 + m_2 + m_3 = 0. \quad (B5)$$

(B4)式中 κ 为整数, 其取值范围限制在使得该式求和号内不出现负整数的阶乘, 因此仅取 κ 有限个值.

由(B5)式知, 在(B1)式中对于给定的 l_i 和 l_j, l 被限制在下述范围:

$$|l_i - l_j| \leq l \leq l_i + l_j, \quad (B6)$$

所以(B1)式中对 l 的求和只有有限项, 其余的为零.

由 (B1), (B3), (B6) 三式得到正文中的(15)式.

- [1] M. Walther, E. Kapon, J. Christen, D. M. Hwang and R. Bhat, *Appl. Phys. Lett.*, **60**(1992), 521.
- [2] A. S. Plaut, H. Bage, P. Grambow, D. Heitmann, K. von Klitzing and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 1642.
- [3] J. Y. Marzin, A. Izreal, L. Birotheau, B. Sermage, N. Roy, R. Azoulay, D. Robein, J. L. Ben-chimol and L. Henny, *Surf. Sci.*, **267**(1992), 253.
- [4] R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. T. Tseing and A. C. Gossard, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 1134.
- [5] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Eskari, *Solid State Commun.*, **45**(1983), 367.
- [6] G. W. Bryant, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 8763.
- [7] Y. Kayanuma and H. Momiji, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 10261.
- [8] T. Takagakara, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 9293.
- [9] J. L. Zhu, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 8780.
- [10] J. L. Zhu, J. J. Xiong and B. L. Gu, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 6001.
- [11] D. S. Chun, C. M. Hsiao and W. N. Mei, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 3898.
- [12] 唐敖庆, 量子化学, 科学出版社(1982), 第67页.
- [13] E. U. Condon, H. Odabasi, *Atomic Structure* (1980), p.145.
- [14] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State* (1976), p.208.
- [15] E. U. Condon, G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra* (1935).

SPECTRAL STRUCTURES OF SHALLOW DONORS IN QUANTUM DOTS

CHEN XI ZHU JIA-LIN

Department of Modern Applied Physics, Tsinghua University, Beijing 100084

(Received 26 April 1993)

ABSTRACT

Using the hydrogenic-effective-mass theory, the spectral structure is calculated employing a linear variational method and presented for a hydrogenic shallow donor in a spherical quantum dot of GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs with the donor ion located at arbitrary position. It is an extension of the calculation in Ref. [10]. The quantum-level sequence and degeneracy for the single electron state in the dot are discussed. Results of calculations indicate that the quantum-level structures depend on the dot radius and the ion position apparently, and that it is important to choose a proper set of base functions in the calculation.

PACC: 7155; 7340L