

透镜型量子点中类氢杂质基态能的计算*

常加峰 曾祥华† 周朋霞 毕 桥

(扬州大学物理科学与技术学院, 复杂性科学中心, 扬州 225002)

(2003 年 6 月 4 日收到, 2003 年 12 月 2 日收到修改稿)

通过有效质量近似和变分法, 研究了垂直磁场下透镜型量子点中类氢杂质基态能量, 并与球型量子点进行了比较. 研究表明, 对于球型量子点, 基态能仅与杂质的偏离距离有关, 与垂直和水平偏离无关, 而对于透镜型量子点, 由于水平方向和垂直方向束缚势的非对称性, 电子基态能不仅与杂质的偏离距离有关, 还与杂质偏离方向有关.

关键词: 透镜型量子点, 基态能, 变分法

PACC: 0365, 2110D

1. 引 言

近年来, 随着纳米技术的发展, 人们可以通过多种方法制造出各种半导体微结构: 超晶格、量子阱、量子线、量子点. 通过降低系统的维数, 可以得到明显的量子特性. 因为量子点在三个方向上对电荷的运动量子化, 所以量子点有着很广泛的应用, 如量子点激光^[1,2]、量子计算^[3,4]等, 已经成为物理学目前研究的热点之一. 量子点的研究之所以能够引起重视, 是因为量子点结构具有一些十分显著的量子化效应, 它直接影响量子点各种物理性质, 如电子结构、输运性质以及光学特性等, 同时它还具有态密度与能量的类 δ 函数依赖性, 使其具有很强的三维量子限制作用. 半导体量子点是能带工程在半导体材料方面最成功的应用. 通过控制量子点的形状、结构与尺寸, 可以调节其能隙、激子的束缚能以及激子的能量蓝移等电子状态, 以满足理论研究和器件设计等不同需要. 低维半导体的量子化效应程度取决于电子受限制的程度, 三维受限量子点是一种尺寸在纳米量级的一种团簇. 这种零维体系的物理行为与原子相似, 因而被称为“人造原子”, 电子在其中的能级呈现类似原子的分裂结构.

利用不同的生长方法、生长条件和材料可以制

造出各种有规则几何形状的量子点: 球型^[5]、椭球型^[6]、圆柱型^[7]、金字塔型^[8]、抛物型^[9]、透镜型^[10-12], 可以用不同的束缚势来代替不同形状量子点对电子的束缚^[13]. 已经有很多理论工作者计算了在量子点中类氢杂质的束缚能. 杨淳青等计算了杂质在球型和抛物型量子点中心时束缚电子的能级和结合能, 并在这两种模型中进行对比^[9,14]. 文献 [15, 16] 分别研究了球型和碟型量子点中有离心类氢杂质时的电子能级. 由于磁场掺杂量子点的薛定谔方程没有严格的解析解, 所以一般用微扰、变分和势场映射方法来解决, 而所考虑的模型多以球型或圆柱型量子点为主. 在本文中, 我们主要通过有效质量近似和变分法来研究垂直磁场下自组生长的透镜型量子点 ($\text{GaAs}/\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$) 中类氢杂质结合能, 并与球型量子点模型进行了比较.

2. 模 型

以分子束外延 (MBE) 和金属有机物汽相沉积 (MOCVD) 为代表的材料生长技术的发展, 使低维半导体加工技术也得到逐渐发展, 特别是自组织生长量子点的发展最迅速, 已经在电子和光电子器件中得以应用, 也是低维半导体加工最为可行的方法. 当异质外延生长厚度小于临界厚度时, 基本是层状生

* 国家自然科学基金 (批准号 60072032) 和江苏省教育厅基金 (批准号 03KJB140152) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xzheng@yzu.edu.cn

长,超过这个值就会岛状生长透镜型量子点^[17].对于这种形状的量子点,实验^[18]和理论^[19]都表明,抛物势是一个很好的近似.我们主要研究透镜型量子点中类氢杂质的结合能与抛物势的大小、量子点的形状、杂质位置和垂直磁场的关系,所以不考虑外加电场.其哈密顿量为

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \\ &\quad + V_{\parallel}(\mathbf{r}) + V_{\perp}(\mathbf{r}) - C, \\ V_{\parallel}(\mathbf{r}) &= \frac{m}{2} \omega_z^2 \alpha_0^2 (x^2 + y^2), \\ V_{\perp}(\mathbf{r}) &= \frac{m}{2} \omega_z^2 (z^2), \\ C &= \frac{e^2}{k |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ 为外加磁场的矢势,当沿着 z 轴方向的外加垂直磁场 $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ 时,设矢势的选取为

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} (Bx, -By, 0). \quad (2)$$

(1) 式中 α_0 是杂质在平行方向与垂直方向的位置比; m 是杂质在半导体中的有效质量,在 GaAs 中 $m = 0.067m_e$. 哈密顿量中第一项是自由电子在磁场中的哈密顿量,第二项 V_{\parallel} 是平行方向抛物势,第三项为垂直方向的抛物势 V_{\perp} ,第四项是量子点中自由电子与杂质的库仑相互作用, \mathbf{r}_0 为杂质的位置, $k = 13.1$,为该半导体中的介电常数.因为电子自旋与轨道耦合强度远小于束缚势大小,可以忽略不计,所以轨道和磁场的耦合可以分开处理.

当外加垂直磁场时,哈密顿量(1)式变成

$$H = H_0 + H', \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m} \left[\mathbf{P}^2 - \frac{eB\hbar}{c} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^2 B^2}{4c^2} (x^2 + y^2) \right] \\ &\quad + \frac{m}{2} \omega_z^2 \alpha_0^2 (x^2 + y^2) + \frac{m}{2} \omega_z^2 (z^2), \\ H' &= - \frac{e^2}{k |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}. \end{aligned} \quad (4)$$

H_0 的基态 Fock-Darwin 解为

$$\begin{aligned} \Psi &= \left(\frac{m\omega_z}{\pi\hbar} \right)^{3/4} \sqrt{\alpha} \\ &\quad \times \exp \left[- \frac{m\omega_z}{2\hbar} (\alpha(x^2 + y^2) + z^2) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

对应基态能级

$$\varepsilon = \hbar\omega_z(1 + 2\alpha)/2, \quad (6)$$

式中

$$\begin{aligned} \alpha(B) &= \sqrt{\alpha_0^2 + B^2/B_0^2} \\ B_0 &= 2mc\omega_L/e. \end{aligned}$$

这里 ω_L 为 Larmor 频率.

我们选取如下试探波函数:

$$\begin{aligned} \varphi &= \exp \left[- \frac{m\omega_z}{2\hbar} (\alpha(x^2 + y^2) + z^2) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda}{R} \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} \right] \end{aligned} \quad (7)$$

式中 λ 为变分参数, $R = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ 为电子的玻尔半径, (x_0, y_0, z_0) 是杂质的坐标.则基态能级

$$E_{\min} = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}. \quad (8)$$

杂质的结合能

$$E_b = \varepsilon - E_{\min}.$$

3. 计算及讨论

首先以 α_0 为控制量子点形状的参数,当量子点为球型量子点时, $\alpha_0 = 1$,这时势场为一球型抛物势.我们主要讨论磁场强度在 0—10 T、杂质偏离势场中心 0—20 nm、束缚势为 $\hbar\omega_z = 16, 36$ meV 两种情况下, $\alpha_0 = 0.25, \alpha_0 = 1$ 两种量子点基态能级的变化.

3.1. 基态能随着磁场的变化

首先计算并比较了束缚势为 $\hbar\omega_z = 16, 36$ meV 透镜型和球型量子点的基态能随着磁场的变化.我们选取杂质处于居中、水平偏离 5, 10 nm 和垂直偏离 5, 10 nm 的情形(图 1).从图 1(c)(d)中可以看出对于球型量子点($\alpha_0 = 1$),由于势场的对称性,在没有外加磁场时杂质水平偏离和垂直偏离时基态能级是一样的,即基态能级与杂质偏离的距离有关,与偏离的方向无关.加上垂直磁场后,水平方向和垂直方向不再对称,随着磁场增强,这种不对称也增强.在偏离相同距离情况下,由于偏离方向不同其基态能不再相同,并且在束缚势较小的时候这种差别更大,这是由于磁束缚的影响对束缚势比较小的量子点影响更大.对于透镜型量子点,其束缚势本身就存在着水平方向和垂直方向的不对称性,并且垂直方向的束缚大于水平方向束缚.所以在没有垂直磁

场,杂质在与量子点中心距离相同而位置不同时,其基态能和束缚能已经不相同.在外加垂直磁场后,对量子点中电子水平束缚增强,这样会降低水平方向和垂直方向的不对称性.从图 1 我们可以看出:在杂

质偏离量子点中心距离相同时,随着外加垂直磁场的增强,杂质水平偏离和垂直偏离的基态能、结合能的差别变小;束缚势大时,水平偏离和垂直偏离的基态能、结合能曲线靠近得慢一点.

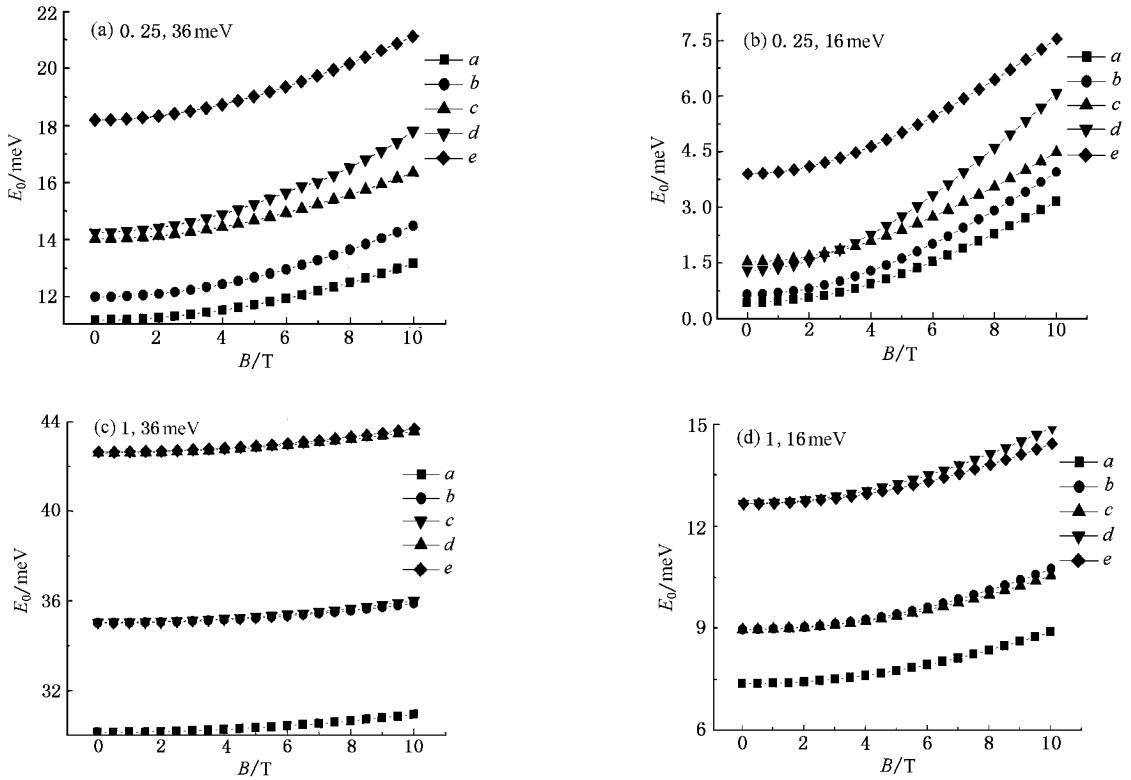


图 1 当束缚势为 $\hbar\omega_z = 16, 36 \text{ meV}$, 杂质位置不同时, 基态能 E_0 随着磁场的变化 (a) $\alpha = 0.25, \hbar\omega = 36 \text{ meV}$ (b) $\alpha = 0.25, \hbar\omega = 16 \text{ meV}$, (c) $\alpha = 1, \hbar\omega = 36 \text{ meV}$ (d) $\alpha = 1, \hbar\omega = 16 \text{ meV}$. 曲线 a 为杂质居中, 曲线 b 为杂质水平偏离 5 nm, 曲线 c 为杂质垂直偏离 5 nm, 曲线 d 为杂质水平偏离 10 nm, 曲线 e 为杂质垂直偏离 10 nm

我们讨论了量子点的杂质位置分别是居中、水平偏离、垂直偏离时,不同束缚势($\hbar\omega_z = 16, 36 \text{ meV}$)不同类型量子点($\alpha_0 = 1, \alpha_0 = 0.25$)基态能随着磁场的变化(图 2).不管是水平或垂直偏离,偏离中心越远,其基态能量越大.同样条件下,球型量子点的能量最大.

3.2. 基态能随杂质位置的变化

我们首先给出在没有外场作用下,量子点对称性对掺杂后电子的基态能的影响.不论量子点束缚势的大小,球型量子点中电子的基态能、结合能只与杂质偏离量子点中心的距离有关,与杂质偏离的方向无关,如图 3(b)所示.从图 3(b)可见,曲线 a 和曲线 c,曲线 b 和曲线 d 完全重叠,说明计算是正确

的.而对于透镜型量子点(图 3(a)),由于没有这种对称性,电子的基态能不仅与杂质偏离距离有关,也与偏离的方向有关.另外,图 3 中给出的结果说明,对于同样的透镜型量子点,随着杂质偏离距离的增加,其不同方向偏离的基态能、结合能曲线有重合的趋势.这是因为随着杂质逐渐偏离量子点中心,对量子点中电子的影响逐渐减小,当杂质和量子点中心之间距离足够远时,电子云的形状对电子和杂质库仑作用影响也就比较小,这时无从从什么方向偏离量子点中心,其基态能、结合能都是一样的.当束缚势比较大时,两种偏离的量子点随着距离的增加,基态能趋于一致,即两条曲线会重合,这可能是由于束缚势大的量子点的电子更加禁锢在量子点中心的缘故.

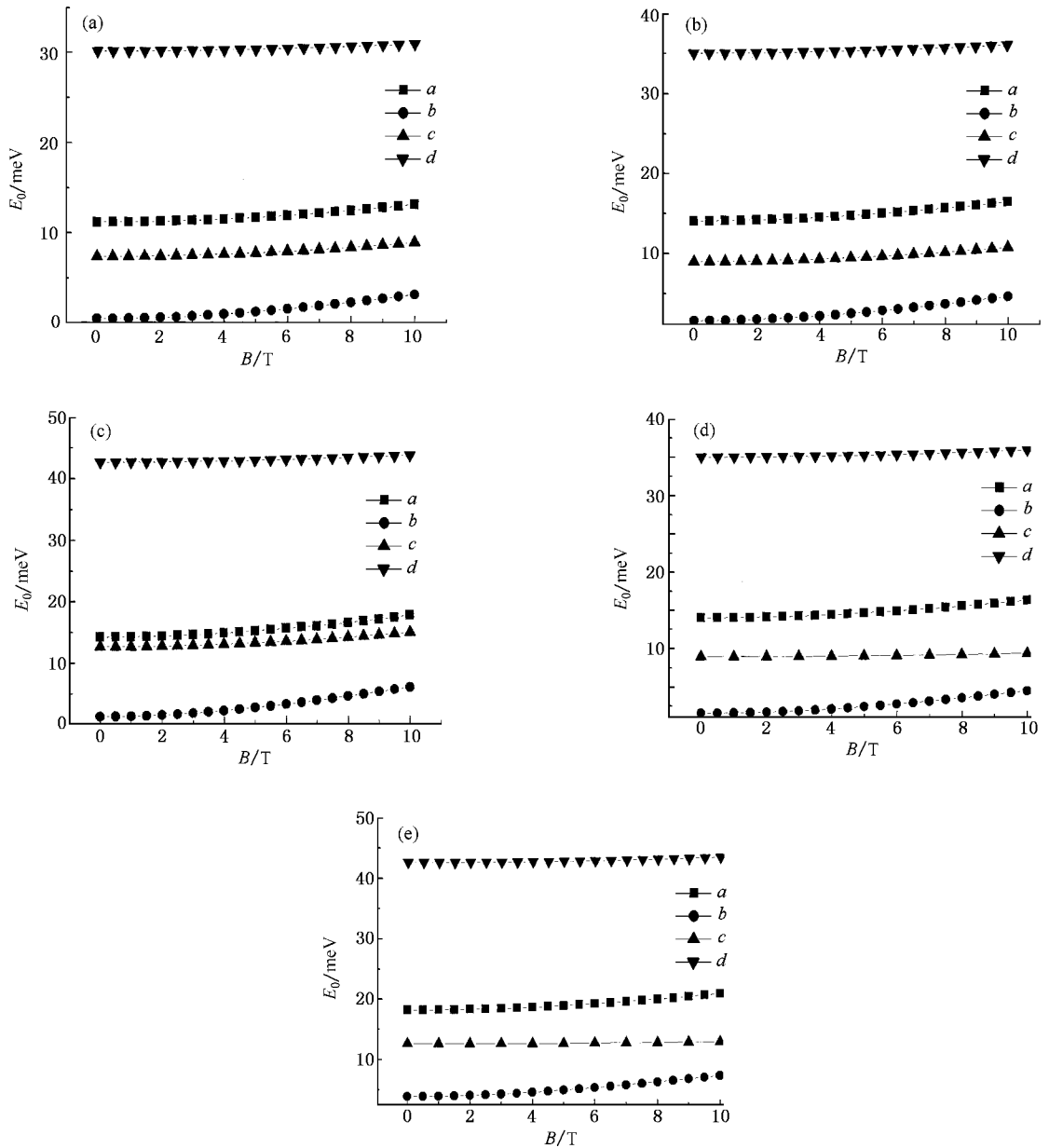


图2 当束缚势 $\hbar\omega_z = 16, 36$ meV 时, 不同类型量子点基态能 E_0 随着磁场的变化 (a) 杂质居中 (b) 杂质水平偏离 5 nm (c) 杂质水平偏离 10 nm (d) 杂质垂直偏离 5 nm, (e) 杂质垂直偏离 10 nm. 曲线 a 为 $\alpha_0 = 0.25$, $\hbar\omega_z = 36$ meV, 曲线 b 为 $\alpha_0 = 0.25$, $\hbar\omega_z = 16$ meV, 曲线 c 为 $\alpha_0 = 1$, $\hbar\omega_z = 16$ meV, 曲线 d 为 $\alpha_0 = 1$, $\hbar\omega_z = 36$ meV

图4 是在外加垂直 10 T 磁场下, 电子的基态能随着杂质位置的变化. 加上磁场以后, 透镜型量子点与没有磁场时变化趋势一致. 即随着量子点距离的增大, 水平偏离和垂直偏离对基态能量影响减小, 但对于弱束缚的量子点垂直偏离和水平偏离的能量差比没有磁场时要小. 对于球型量子点能量的差异只与偏离的距离和束缚势有关, 与偏离的位置(垂直和水平偏离)基本无关.

4. 结 论

本文利用有效质量近似和变分法, 研究了垂直磁场下自组生长的透镜型量子点($\text{GaAs}/\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$) 中类氢杂质结合能, 并与球型量子点模型进行了比较.

对于球型量子点, 在没有外加磁场时杂质水平偏离和垂直偏离时基态能是一样的, 即基态能级与

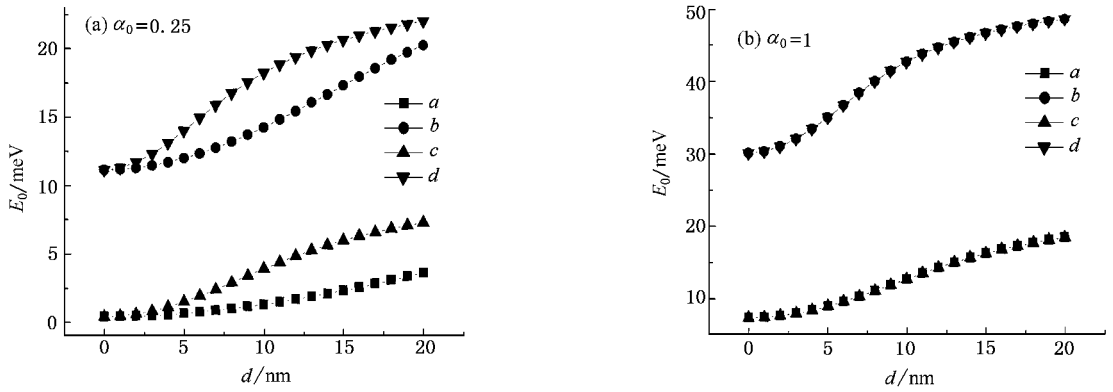


图3 在无外加磁场下,基态能 E_0 随着杂质位置的变化 (a) $\alpha_0 = 0.25$, (b) $\alpha_0 = 1$. 曲线 a 为 $\hbar\omega_z = 16$ meV, 杂质水平偏离, 曲线 b 为 $\hbar\omega_z = 36$ meV, 杂质水平偏离, 曲线 c 为 $\hbar\omega_z = 16$ meV, 杂质垂直偏离, 曲线 d 为 $\hbar\omega_z = 36$ meV, 杂质垂直偏离

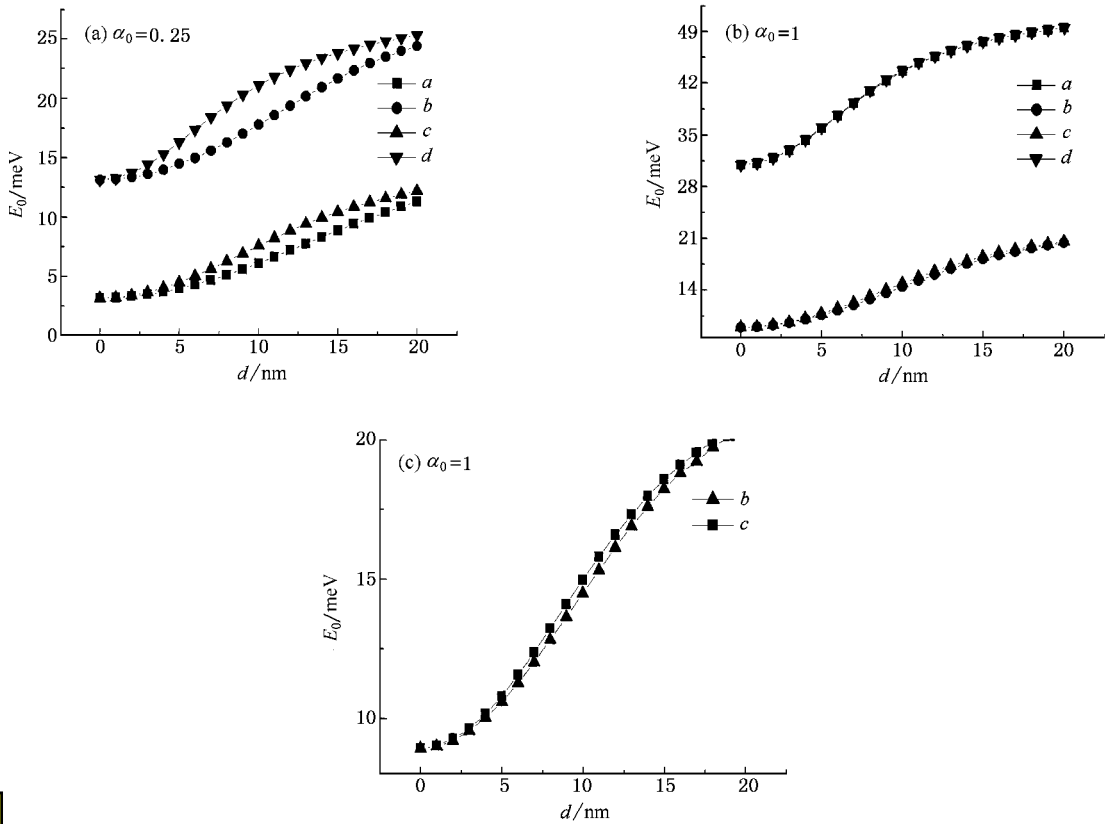


图4 在外加垂直磁场为 10 T 下,基态能 E_0 随着杂质位置的变化 (a) $\alpha_0 = 0.25$ (b) $\alpha_0 = 1$. (c) 为 (b) 中曲线 b 和曲线 c 的放大图. 曲线 a 为 $\hbar\omega_z = 16$ meV, 杂质水平偏离, 曲线 b 为 $\hbar\omega_z = 36$ meV, 杂质水平偏离, 曲线 c 为 $\hbar\omega_z = 16$ meV, 杂质垂直偏离, 曲线 d 为 $\hbar\omega_z = 36$ meV, 杂质垂直偏离

杂质偏离的距离有关,而与偏离的方向无关.加上垂直磁场后,基态能对于水平偏离和垂直偏离影响不大,只与偏离的距离有关,距离越远,基态能量越大.

对于透镜型量子点,其束缚势本身就存在着水平方向和垂直方向的不对称性,并且垂直方向的束缚势大于水平方向束缚势.由于没有势场的对称性,

电子的基态能不仅与杂质偏离距离有关,也与偏离的方向有关.

当束缚势较大时,两种偏离的量子点随着量子点距离的增加,基态能量趋于一致,即两条曲线会重合.这可能是因为束缚势大的量子点的电子更加禁锢在量子点中心.加上磁场以后,透镜型量子点与没

有磁场时变化趋势一致,即随着量子点距离的增大,水平偏离和垂直偏离对基态能量影响减小.但对于弱束缚的量子点,垂直偏离和水平偏离的能量差比

没有磁场时要小.对于球型量子点,能量的差异只与偏离的距离和束缚势有关,与偏离的位置(垂直和水平偏离)基本无关.

- [1] Micirin S S *et al* 2000 *Semicond. Sci. Techn.* **15** 1061
- [2] Summers H D *et al* 2001 *Semicond. Sci. Techn.* **16** 140.
- [3] Loss D, DiVincenzo D P 1998 *Phys. Rev. A* **57** 120
- [4] Burkard G, Loss D, DiVincenzo D P 1999 *Phys. Rev. B* **59** 2070
- [5] Bose C, Sarkar C 2000 *Phys. Stat. Sol. B* **218** 461
- [6] Dvovyan K G, Kazaryan E M 2001 *Phys. Stat. Sol. B* **228** 695
- [7] Sugawara M 1995 *Phys. Rev. B* **51** 10743
- [8] Grundman M, Ledentsov N, Stier O *et al* 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 979
- [9] Yang C C, Huang Y S 2000 *Phys. Lett. A* **278** 88
- [10] Petroff P M, Denbaars S P 1994 *Superlatt. Microstruct.* **15** 15
- [11] Fafard S, Leon R, Leonard D *et al* 1995 *Phys. Rev. B* **52** 5752
- [12] Drexel H, Leonard D, Hansen W *et al* 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2252
- [13] Barker J A, O'Reilly E P 1999 *Physica E* **4** 231
- [14] Huang Y S, Yang C C, Liaw S S 1999 *Phys. Rev. A* **60** 85; Yang C C 2001 *Chin. J. Phys. (Taipei)* **39** 625
- [15] Bose C, Sarkar C 1998 *Physica B* **253** 238
- [16] Wensauer A *et al* 2001 *Phys. Stat. Sol. B* **224** 675
- [17] Leon R, Fafard S, Leonard D *et al* 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 521
- [18] Fricke M, Lorke A, Kotthaus J P *et al* 1996 *Europhy. Lett.* **36** 197
- [19] Wojs A, Hawrylak P, Fafard S *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **54** 5604

Calculation of the ground-state energies of hydrogen-like impurity in a lens-shaped quantum dot^{*}

Chang Jia-Feng Zeng Xiang-Hua Zhou Peng-Xia Bi Qiao

(College of Physics Science and Technology, Complexity Science Center,
Yangzhou University, Yangzhou 225002, China)

(Received 4 June 2003; revised manuscript received 2 December 2003)

Abstract

Compared with the spherical quantum dot, the ground-state energies of hydrogen-like impurity in a lens-shaped quantum dot (GaAs/In_{1-x}Ga_xAs) under vertical magnetic field have been discussed by using effective mass approximation and variational method. It is found that for the spherical quantum dot, the ground-state energy is only related with the deviation of distance of the impurity, but not with the in-plane or perpendicular deviation. For a lens-shaped quantum dot, due to the asymmetry of the bound potential of in-plane and perpendicular to the plane, the electronic ground-state energies are related not only with the deviation of distance but also with the deviation of direction.

Keywords: lens-shaped quantum dot, ground-state energies, variational method

PACC: 0365, 2110D

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60072032) and the Foundation of the Education Bureau of Jiangsu Province, China (Grant No. 03KJB140152).