

耦合量子点中空穴基态反键态特性研究*

汤乃云[†]

(上海电力学院电子科学与技术系, 上海 200090)

(2012年3月31日收到; 2012年10月12日收到修改稿)

本文采用六带 K·P 理论计算了耦合量子点在不同耦合距离下空穴基态特性, 探讨了轻重空穴及轨道自旋相互作用对耦合量子点空穴基态反键态特性的影响. 在考虑多带耦合的情况下, 耦合量子点随着耦合强度的变化, 价带基态能级和激发态能级发生反交叉现象. 同时, 随着耦合距离的增加, 量子点基态轻重空穴波函数的比重发生变化, 导致量子点空穴基态波函数从成键态反转成为反成键态. 同时研究发现, 因空穴基态及激发态波函数特性的转变, 电子、空穴的基态及激发态波函数的叠加强度发生的明显变化.

关键词: 耦合量子点, 反键态, 多带理论, 自旋轨道耦合

PACS: 73.21.La, 78.67.Hc, 81.07.Ta

DOI: 10.7498/aps.62.057301

1 引言

半导体量子点和量子线体系在固态量子计算和量子信息方面具有潜在的物理优势, 并与现有的半导体光电子技术联系紧密, 而受到极大关注. 比如量子点中电子或空穴自旋相干时间长以及激子具有纠缠等特性在量子计算方面得到了应用^[1,2]. 为了完成大规模的固态量子计算, 必须实现量子点或量子线之间的耦合, 基于两个耦合量子体系的纠缠激子对可以实现一些量子比特门的操作以及电子传输等, 因此对低维耦合量子体系中电子或空穴量子态的研究以及其在电磁场下的量子调控行为逐渐受到了人们的广泛关注^[3-5]. 到目前为止, 对耦合量子点体系的电子态研究均采用单带有效质量近似方法. 这种模型对研究导带电子特性较为正确, 然而用于价带空穴特性研究有一定的局限性. 价带空穴来源于分子 P 轨道自旋, 因此具有较强的自旋-轨道耦合, 导致重空穴和轻空穴发生强烈耦合. 在单个量子点内部, 轻重空穴间的耦合因量子局限效应被弱化, 故分裂为轻重空穴带. 最近的研究表明, 因价带结构复杂, 在耦合量子点体系中, 空

穴基态显示为反键态特性^[6-9], 因而采用单带有效质量模型描述量子点空穴特性具有一定的局限性. 基于上述分析, 本文使用 K·P 六带有效质量模型描述空穴子带间的轨道自旋耦合, 模拟垂直耦合长方体形状量子点空穴基态随量子点间距变化情况.

2 计算模型和方法

计算使用的耦合体系为垂直耦合 GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.65}As 量子点, 生长方向为 Z 轴, 量子点为半圆形结构, 两个量子点具有相同的高度 $h = 10$ nm 和直径 $r = 2.5$ nm, 量子点间距为 d , d 在 0.5—5 nm 范围内变化, 对应量子点间的耦合强度由强到弱. 整个计算工作使用了 Walter Schottky 研究小组开发的 nextnano 软件包^[10]. 在计算中采用 6 带 K·P 模型哈密顿的表达式如下:

$$H = H_{V\bar{V}} + H_{\text{strain}} + H_{\text{SO}} + U,$$

其中 $H_{V\bar{V}}$ 为波矢相关项, H_{SO} 为自旋轨道相互作用项, H_{strain} 为应变项, U 为 InAs/GaAs 材料的平均价带带阶. 参通过布洛赫波展开, 系统的 6×6 KP 哈密顿量表示为

* 国家自然科学基金 (批准号: 61204105), 上海自然科学基金 (批准号: B10ZR1412400) 和上海市科技创新行动计划地方院校能力建设项目 (批准号: 10110502200) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: naiyun@mail.sitp.ac.cn

$$H_{VV} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} [Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2)]l & Nk_xk_y l & Nk_xk_z l \\ Nk_xk_y l & [Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2)]l & Nk_yk_z l \\ Nk_xk_z l & Nk_yk_z l & [Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2)]l \end{bmatrix},$$

其中, m_0 为自由电子质量, l 为 2×2 矩阵. 同时,

$$L = -(\gamma_1 + 4\gamma_2), \quad M = -(\gamma_1 - 2\gamma_2), \quad N = -6\gamma_3,$$

γ_i 是 Luttinger 常数.

哈密顿量中的 H_{SO} 项的表达式为

$$H_{SO} = \frac{\Delta_0}{3} \begin{pmatrix} -l & i\sigma_z & i\sigma_y \\ i\sigma_z & -l & i\sigma_x \\ i\sigma_y & i\sigma_x & -l \end{pmatrix},$$

式中的 Δ_0 是不考虑应变时 T 点的轨道自旋轨道分裂, σ_i 是泡利自旋矩阵. 哈密顿量中的 H_{strain} 的表达式为

$$H_{\text{strain}} = \begin{bmatrix} [l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})]l & n\varepsilon_{xy}l & n\varepsilon_{xz}l \\ n\varepsilon_{xy}l & [l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz})]l & n\varepsilon_{yz}l \\ n\varepsilon_{xz}l & n\varepsilon_{yz}l & [l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})]l \end{bmatrix},$$

其中 $l = a_v + 2b$, $m = a_v - b$, $n = \sqrt{3}d$, a_v, b 和 d 是形变常数.

3 分析与讨论

图 1 为采用单带有效质量模型计算耦合量子点价带基态以及第一激发态的能量随耦合距离 d 的关系, 插图为计算所得 $d = 2 \text{ nm}$ 及 $d = 3.5 \text{ nm}$ 的波函数分布, 因量子点体系波函数为三维波函数, 故在插图中仅画出沿生长方向 (Z 轴) 波函数分量. 计算过程中忽略了库仑和交换关联作用. 从插图中的波函数分布可知, 量子点的空穴基态为成键态, 激发态为反成键态. 当量子点间距离从 0.5 nm 增加到 5 nm 时, 空穴的成键态能量随量子点间距增大而增大, 而反束缚态能量则逐渐减小.

图 2 是采用六带 $K \cdot P$ 模型计算的耦合量子点内部的空穴基态和激发态能量随耦合距离 d 的关系, 插图为计算所得 $d = 2 \text{ nm}$ 及 $d = 3.5 \text{ nm}$ 的波函数分布的 Z 轴分量. 和图 1 不同, 空穴的基态和激发态能级随着距离 d 的增加有反交叉现象. 当 d 由 1 nm 逐渐增大时, 空穴基态 (成键态) 能级逐渐上升, 而激发态 (反成键态) 能级则迅速下降, 其能级差逐渐减小; 当 $d = 3 \text{ nm}$ 时, 两个能级形成交叉态势, 此时空穴基态变成了反键态, 而激发态变成了成键态. 由于在图 2 的计算过程中, 多带模型考虑了轻重空穴耦合及自旋轨道相互作用, 而单带

模型只考虑了重空穴效应, 故而可知轻重空穴的耦合及自旋轨道作用导致量子点体系空穴基态成为反键态.

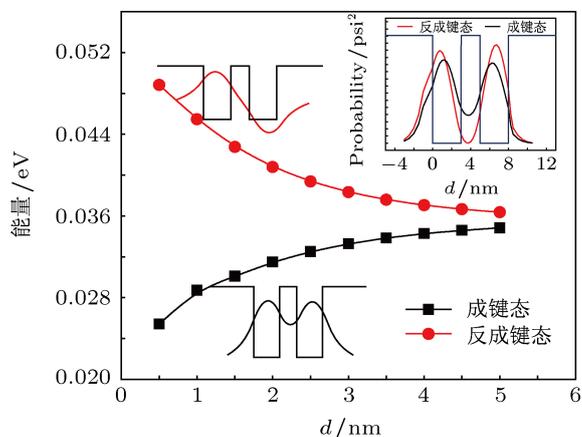


图 1 采用单带模型计算耦合量子点价带基态以及第一激发态能量随量子点间距的变化 (插图为计算所得 $d = 2 \text{ nm}$ 及 $d = 3.5 \text{ nm}$ 的波函数分布)

图 3 计算了耦合量子点体系中空穴基态的轻重空穴 (HH, LH) 波函数比例, 如图所示, 当 $d < 3 \text{ nm}$ 时, 空穴基态中重空穴比例高于轻空穴比例. 根据 Climente 等的报道 [6], 因空穴基态中重空穴基态为成键特性, 轻空穴分支为反键特性, 故空穴基态特性总体表现为成键态. 当 $d > 3 \text{ nm}$ 时, 轻空穴波函数的比例增加, 即轻空穴的影响加剧, 空穴基态

中反成键组分增加, 故随着距离的增加, 使得空穴基态变成反键态.

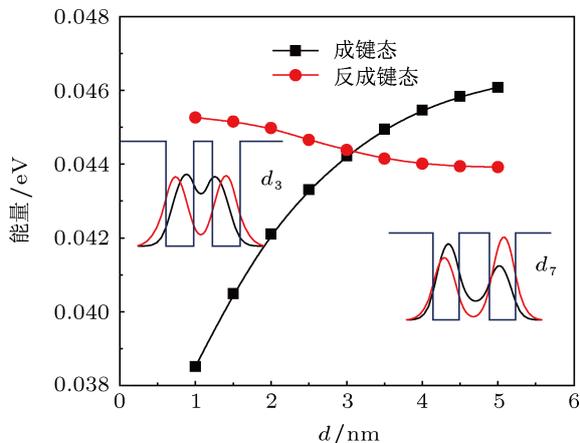


图2 采用六带模型计算的耦合量子点内部基态和激发态能级 (插图为计算所得 $d = 2 \text{ nm}$ 及 $d = 3.5 \text{ nm}$ 的波函数分布)

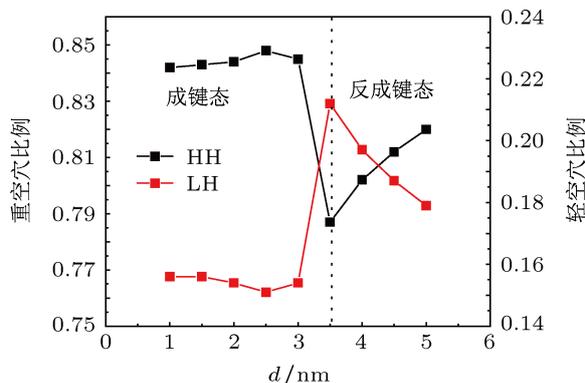


图3 空穴基态的轻重空穴 (HH, LH) 波函数比例. 虚线为能级反交叉距离

为了进一步了解多带效应对量子点分子态形成的情况, 我们分析了导带第一能级和价带第一及第二能级波函数的交叠情况. 图4是采用六带 K-P 模型计算的价带第一、二能级和导带第一、二能级之间波函数的叠加, 即对 $(\psi_i^*(\mathbf{x})\psi_j(\mathbf{x})d\mathbf{x})$ 进行求和计算. 在 $d < 3 \text{ nm}$ 时, 价带第一能级是成键态, 故其与同样是成键态的导带基态波函数之间较大的交叠; 与此相反, 导带第二能级因其反成键的特性, 与成键态的价带基态波函数之间的交叠为零. 当 $d = 3 \text{ nm}$ 时, 成键态和反成键发生翻转, 即价带第一能级从成键态转变成反成键态, 故其与成键态的导带基态波函数之间交叠为零, 而与导带第二能级的反键态波函数之间交叠较大. 随着 d 的增加, 导带第一能级和价带第一能级波函数间的交叠强度在 $d = 3 \text{ nm}$ 时迅速减小, 而导带第二能级和价带第一能级波函数间交叠强度在 $d = 3 \text{ nm}$ 时迅速增

大. 两条波函数交叠在 $d = 3 \text{ nm}$ 时发生交叉.

图5为不同耦合距离下 $\text{Al}_{0.36}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ 势垒中电子、空穴波函数的分布随电场强度的变化. 当

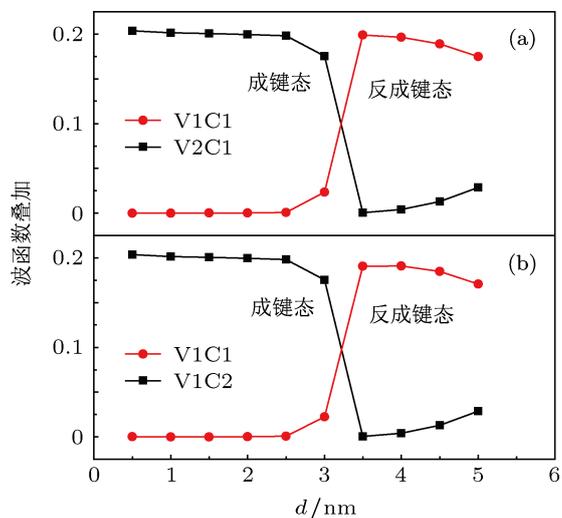


图4 价带第一能级和导带第一、二能级之间波函数叠加 (图中 C_1, C_2 为电子的基态及第一基态, V_1, V_2 为空穴的基态及第一激发态) (a) V_1-C_1, V_2-C_1 波函数叠加; (b) V_1-C_1, V_1-C_2 波函数叠加

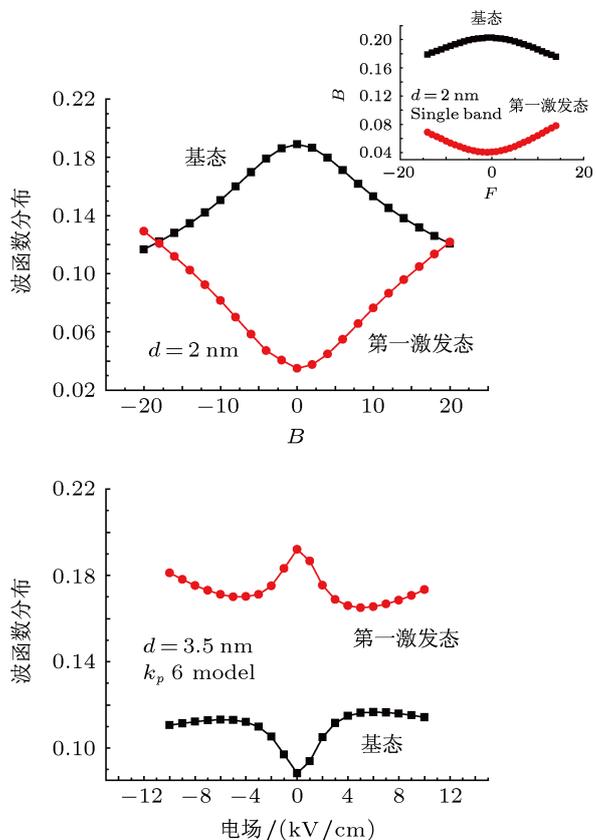


图5 (a) $d = 2 \text{ nm}$ (b) $d = 3.5 \text{ nm}$ 时 $\text{Al}_{0.36}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ 势垒中电子、空穴波函数的分布随电场强度的变化 (插图为采用单带计算得到结果)

$\text{Al}_{0.36}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ 势垒厚度为 $d = 2 \text{ nm}$ 时, 计算结果与插图中的单带计算结果相似, 空穴基态即成键态的组分大于第一激发态 (反键态); 同时, 基态的波函数组分随外加电场增加而减小. 当量子点间势垒厚度增加到 $d = 3.5 \text{ nm}$, 基态和第一激发态发生了反转, 基态成为反键态, 其波函数组分随电场增加而增加, 而第一激发态为成键态, 波函数组分则随电场增加而相应减小.

4 结 论

本文从理论上系统地分析了 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.36}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ 耦合量子点在不同耦合强度下价带空穴的变化规律, 提出了采用计算价带基态和激发态波函数与导带基态波函数交叠趋势来判断量子点价带基态波函数属性的方法.

-
- [1] Wu S Q, Chen J F, Zhao G P 2004 *Acta Phys. Sin.* **61** 087203 (in Chinese) [吴绍全, 陈佳峰, 赵国平 2012 物理学报 **61** 087203]
- [2] Holleitner A W, Blick R H, Hüttel A K, Eberl K, Kotthaus J P 2002 *Science*. **297** 70
- [3] Bayer M, Hawrylak P, Hinzer K, Fafard S, Korkusinski M, Wasilewski Z R, Stern O, Forchel A 2001 *Science*. **291** 451
- [4] Krenner H J, Sabathil M, Clark E C, Kress A, Schuh D, Bichler M, Abstreiter G, Finley J J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 057402
- [5] Doty M F, Climente J I, Greilich A, Yakes M, Bracker A S, Gammon D 2010 *Phys. Rev. B* **81** 035308
- [6] Yakimov A I, Bloshkin A A, Dvurechenskii A V 2008 *Phys. Rev. B* **78** 165310
- [7] Bester G, Zunger A, Shumway J 2005 *Phys. Rev. B* **71** 075325
- [8] Climente J I, Korkusinski M, Goldoni G, Hawrylak P 2008 *Phys. Rev. B* **78** 115323
- [9] Jask'olski W, Zieli'nski M, Bryant G W, Aizpurua J 2006 *Phys. Rev. B* **74** 195339
- [10] <http://www.nextnano.de/nextnano3/>

Bonding-antibonding ground state transition in coupled quantum dots*

Tang Nai-Yun[†]

(*Department of Electronic Science and Technology, Shanghai University of Electric Power Shanghai 200090, China*)

(Received 31 March 2012; revised manuscript received 12 October 2012)

Abstract

The two lowest single-particle hole states in two vertically coupled quantum dots (CQDs) are investigated by using the six-band K·P model. A bonding-antibonding ground-state transition is observed with interdot distance increasing. This result is counterintuitive, for the antibonding molecular ground state has never been observed in natural diatomic molecules. By comparing the wavefunction component of hole, we verify that the reordering of bonding and antibonding orbitals with interdot distance increasing is caused by spin-orbit interaction of holes.

Keywords: coupled quantum dots, antibonding ground-state, six-band K·P model, spin-orbit interaction

PACS: 73.21.La, 78.67.Hc, 81.07.Ta

DOI: 10.7498/aps.62.057301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61204105), the Natural Science Foundation of Shanghai (Grant No. B10ZR1412400), and the Innovation capacity building project of Shanghai (Grant No. 10110502200).

[†] Corresponding author. E-mail: naiyun@mail.sitp.ac.cn