

掺杂对量子点电子结构的影响*

何春山, 黄钢明
(中山大学物理学院, 广东 广州 510275)

摘要: 用有效质量近似理论和哈密顿量 H 对角化方法计算了在谐振子势中, 量子点 (含 8 个极化电子) 的本征能量和本征波函数, 并通过从本征波函数中提取一体、二体和三体密度函数的方法, 得到了电子结构的直观图像。分析了掺杂 (带单位正电荷或单位负电荷的杂质) 对量子点电子结构的影响。研究表明: 正掺杂会增加量子点中心电荷的聚集, 而负掺杂则会在量子点中心形成电荷空白区。

关键词: 量子点; 电荷密度; 掺杂; 电子结构

中图分类号: O413.1 文献标志码: A 文章编号: 0529-6579 (2018) 04-0110-05

The electronic structures' change of doped quantum dot

HE Chunshan, HUANG Gangming

(School of Physics, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: With the effective-mass approximation and the method of diagonalization of the Hamiltonian, the eigenvalue of energy and the eigen-wave-function of quantum dots (8 polarized electrons) have been calculated in the harmonic oscillator potential, and the clear electronic structures have been gained by the methods of one-body, two-body and three-body density functions. The electronic structures' change is analyzed when the quantum dot is doped (adding one positive or negative electron). The results show that positive doping increases the aggregation of the central charge of the quantum dots, while the negative dopant forms the charge void at the center.

Key words: quantum dot; charge density; doping; electronic structures

随着科技的发展和进步, 人们对于人造原子、新奇量子特性材料的兴趣越来越浓厚。二维材料量子点作为一种人造微观系统有着十分广泛的应用前景^[1], 人们可以按照自己对材料性质的要求, 通过控制量子点外加电磁场、掺杂和尺寸等因素, 制造各种类型的材料和微观器件。这类微观系统中的量子效应会影响材料的性质, 因而可能出现一些新的物理现象和规律, 故理论上有着重要的研究价值^[2-3]。理论上研究其结构特征和性质的方法主要

有 Hartree-Fock 方法^[4], 对角化方法^[5]等。影响量子点性质的主要原因是它的电子结构^[6]。量子点中电子结构分布为核 + 环已经被一些研究工作证实^[7-8], 其结构不仅受外加电磁场和掺杂的影响, 而且受到系统对称性的制约^[9-11]。但是, 掺杂对能量和电子结构的影响仍缺乏较深入的讨论。

本文用有效质量近似和少体物理方法讨论了在谐振子势中有 8 个极化电子时, 首态 (角动量子数 L 相同的一系列态中能量最低的态) 能量和

* 收稿日期: 2017-08-16

基金项目: 国家自然科学基金 (11374375)

作者简介: 何春山 (1971 年生), 男; 研究方向: 理论物理; E-mail: stshcs@tom.com

通信作者: 黄钢明 (1958 年生), 男; 研究方向: 理论物理; E-mail: stshgm@mail.sysu.edu.cn

电子结构的特性；用一体、二体和三体密度函数的分析方法得到了直观的电子结构；研究了量子点中心掺入一个固定杂质（含单位正电荷或单位负电荷）对有效电荷分布和电子结构的影响。

1 计算方法

在二维平面（设为 $x-y$ 平面）上有一个包含 N 个电子的量子点，在量子点中有频率为 ω_0 的一个轴对称的谐振子势，并在量子点中心掺入带电荷（ Z ）的杂质。系统的哈密顿量为：

$$H = T + U + V \quad (1)$$

$$T = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_j^2 \quad (2)$$

$$U = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r_j^2 + \sum_{j=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_j} \quad (3)$$

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{j < k} \frac{1}{r_{jk}} \quad (4)$$

式中， T 、 U 和 V 分别是动能、势能和相互作用能。根据有效质量近似，量子点中电子的有效质量为 m^* （在 GaAs 量子点中 $m^* = 0.067m_e$ ）， ϵ_0 是真空中介电常数， ϵ_r 是介质的相对介电常数（在 GaAs 量子点中 $\epsilon_r = 12.4$ ）， $\hbar\omega_0 = 3\text{meV}$ 。

考虑一个质量为 m^* 的不带电粒子，处在 Ω 的谐振子势场中，其哈密顿量为：

$$h = - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{1}{2} m^* \Omega^2 r^2 \quad (5)$$

其中， Ω 是变分参数，一般不等于 ω_0 。设 h 的本征函数为 ψ_i （量子数 $i = m, k, \mu$ ），其空间波函数为 ϕ_{mk} ，自旋波函数为 χ_μ （ $\mu = \pm \frac{1}{2}$ ），故有 $\psi_i = \phi_{mk} \chi_\mu$ 。其中， ψ_i 作为单粒子基矢， m 和 k 分别是正转和逆转声子数，且 $m, k = 0, 1, 2, \dots$ 。空间波函数的表达式为：

$$\phi_{mk}(\xi, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\sum_{j=0}^n d_j^m \xi^{2(n-j)} \right) \xi^{l m - k l} e^{-\frac{1}{2}\xi^2 + i(m-k)\varphi} \quad (6)$$

其中， $\xi = \sqrt{\frac{m^* \Omega}{\hbar}} r$ ， $d_j^m = (-)^j \frac{\sqrt{m!k!}}{j!(m-j)!(k-j)!}$ ， $n = \text{Min}(m, k)$ ， φ 是 \vec{r} 的方位角。

这些单粒子基矢是正交归一的。而多粒子基矢波函数可表示为单粒子基矢波函数的乘积形式。系统讨论的是费米子（电子），所以要将乘积基矢反对称化。在电子极化状态下，只需空间波函数反对称化即可，因而 N 个电子空间基矢波函数的形式为：

$$\Phi_\alpha(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{m_1 k_1}(\vec{r}_1) & \varphi_{m_1 k_1}(\vec{r}_2) & \cdots & \varphi_{m_1 k_1}(\vec{r}_N) \\ \varphi_{m_2 k_2}(\vec{r}_1) & \varphi_{m_2 k_2}(\vec{r}_2) & \cdots & \varphi_{m_2 k_2}(\vec{r}_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \varphi_{m_N k_N}(\vec{r}_1) & \varphi_{m_N k_N}(\vec{r}_2) & \cdots & \varphi_{m_N k_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (7)$$

对角动量为 L 的波函数用多粒子基矢展开得：

$$\Psi = \sum C_\alpha \Phi_\alpha \quad (8)$$

这里 C_α 是展开系数，系统中的角动量是一个守恒量，所以这些基矢波函数要受到 $\sum_i (m_i - k_i) = L$ 的限制。

将哈密顿量写成多粒子基矢表示的矩阵形式，对哈密顿矩阵进行对角化就可求出在角动量 L 一定的条件下，哈密顿量的本征波函数和本征能量。理论上基矢可取无限多，所以要采用一定的方法来保证，在计算精度满足的条件下使用有限的基矢来计算。即在众多的基矢中选择有效的基矢，具体的方法是限制每个单粒子基矢的正转声子数 m_i 和逆转声子数 k_i 的大小，即令 $m_i \leq m_{\max}$ 和 $k_i \leq k_{\max}$ ，并满足 $\sum_i (m_i - k_i) = L$ 。即便如此，基矢的数目仍然非常多，为进一步减少基的个数，采取如下措施：在基矢的选择中，选择对基态和低激发态贡献大的基矢，而忽略贡献较小的基矢，即先计算哈密顿矩阵对角元 $H_{\alpha\alpha} = \langle \Phi_\alpha | H | \Phi_\alpha \rangle$ ，然后从小到大排序。选取前面 J 个最小的矩阵元 $H_{\alpha\alpha}$ 所对应的 Φ_α 作为对角化哈密顿的基矢。为了检验以上方法的可靠性，只要将 J 加大到某个 J' （ $J' > J$ ），然后比较本征能量的变化，使其达到计算精度的要求。

通过对角化得到态的本征能量和本征波函数。但本征波函数是一堆数字，不能得到电子之间关联的细节和直观的电子结构图像。为此，从本征波函数中提取一体、二体和三体密度函数^[8]，一体密度函数定义如下：

$$\rho_1(r_1) = \int |\Psi_L|^2 dr_2 dr_3 \cdots dr_N \quad (9)$$

二体密度函数是将其中一个电子固定在 r_1 处，定义式为：

$$\rho_2(r_1, r_2) = \int |\Psi_L|^2 dr_3 dr_4 \cdots dr_N \quad (10)$$

三体密度函数是将其中两个电子分别固定在 r_1, r_2 处，定义式为：

$$\rho_3(r_1, r_2, r_3) = \int |\Psi_L|^2 dr_4 dr_5 \cdots dr_N \quad (11)$$

2 计算结果和分析

2.1 本征能量的分析

我们的计算对象是 GaAs 量子点中有 8 个极化电子 ($N=8$), 在量子点中心固定有一个带电的杂质 ($Z=0, \pm 1$; $Z=0$ 表示不掺杂), 外加磁场为 10 T. 设 $E((L)_i)$ 表示 $(L)_i$ 态的本征能量. 对于首态 $(L)_1$ 的情况, 如果除去电子之间的库仑相互作用, 所有的电子将落到最低朗道能级上, 这时本征能量就等于 $(L+N)\hbar\omega_0$. 因此, 我们用 $\varepsilon(L) \equiv E((L)_1) - (L+N)\hbar\omega_0$ 表示首态电子之间库仑排斥力的大小^[11]. 库仑排斥力随 L 的变化曲线, 如图 1 所示. 由图 1 可知, 当角动量 L 增大时, 库仑排斥力将减少, $\varepsilon(L)$ 随 L 均呈现单调下降的趋势. 从能量趋势上看不出掺杂的显著影响, 因此有必要研究电子结构跟掺杂的关系.

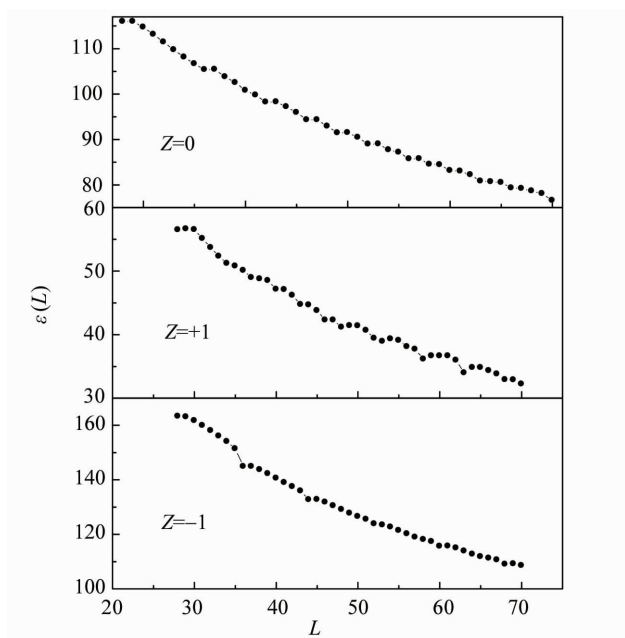


图 1 $\varepsilon(L)$ 随 L 的变化曲线

Fig. 1 The change curve of $\varepsilon(L)$ with L

2.2 一体密度对电子结构的影响

一体密度主要反映二维量子点的电子密度随着极轴距离变化的情况, 图 2 列出了几种有代表性的角动量所对应的一体密度. 图 2 的第一列对应于不掺杂 ($Z=0$) 的情况, $L=34, 38$ 的一体密度呈现出双峰, 对应的是双环的电子结构; $L=36$ 对应的是涡旋态; $L=35, 40, 42, 63$ 时在中心位置 ($r=0$) 电子密度最大, 外围还有一个峰值, 为核+环的电子结构. 图 2 的第二和第三列是掺入一个

负杂质 ($Z=-1$) 和正杂质 ($Z=+1$) 时的一体密度. 从图中可以看出, 负掺杂的结果是, 电子在中心不再占居; 而正掺杂的结果是, 几乎都形成了核+环的结构, 核与环之间有一个明显的极小值, 这和其他学者得到量子环的结构是一致的.

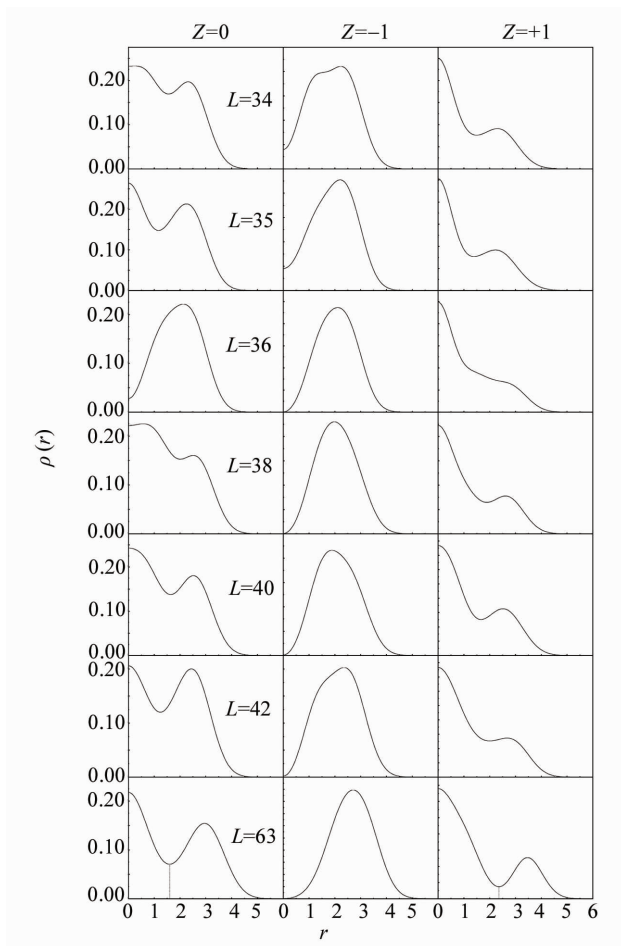


图 2 首态一体密度 $\rho(r)$ 与极轴、角动量和掺杂的关系

Fig. 2 $\rho(r)$ of the first state versus polaxis, L and doping

2.3 二体、三体密度对电子结构的影响

因一体密度不能清楚看到核和环中电子结构的具体几何分布, 下面将重点讨论角动量 $L=63$ 的类晶结构, 并用二体和三体密度来分析电子分布与掺杂的关系. 图 3 是 $L=63$ 、外磁场 $B=10$ T 的二体和三体密度, 图中黑点为固定电子处. 由图 3 可以看出: 未掺杂时, 电子结构为 1-7, 即内核占居一个电子, 外环的七个电子中心点近似处于正七边形的顶点上. 正掺杂时, 电子结构虽然还是核+环的结构, 但分布形态变为 3-5, 即核心区的有效电子数增加; 而负掺杂时, 电子结构发生了质的变化, 核心区域中心变成了空白, 核心区域的电子往外迁移, 八个电子分布在外环上, 分布形态为 0-

8. 我们还计算了外磁场 $B = 20$ T 的正负掺杂的情况，得到的电子结构几何分布与 $B = 10$ T 没有明显

的区别，这与已有的研究结论一致，即磁场只影响量子点的尺寸^[12]。

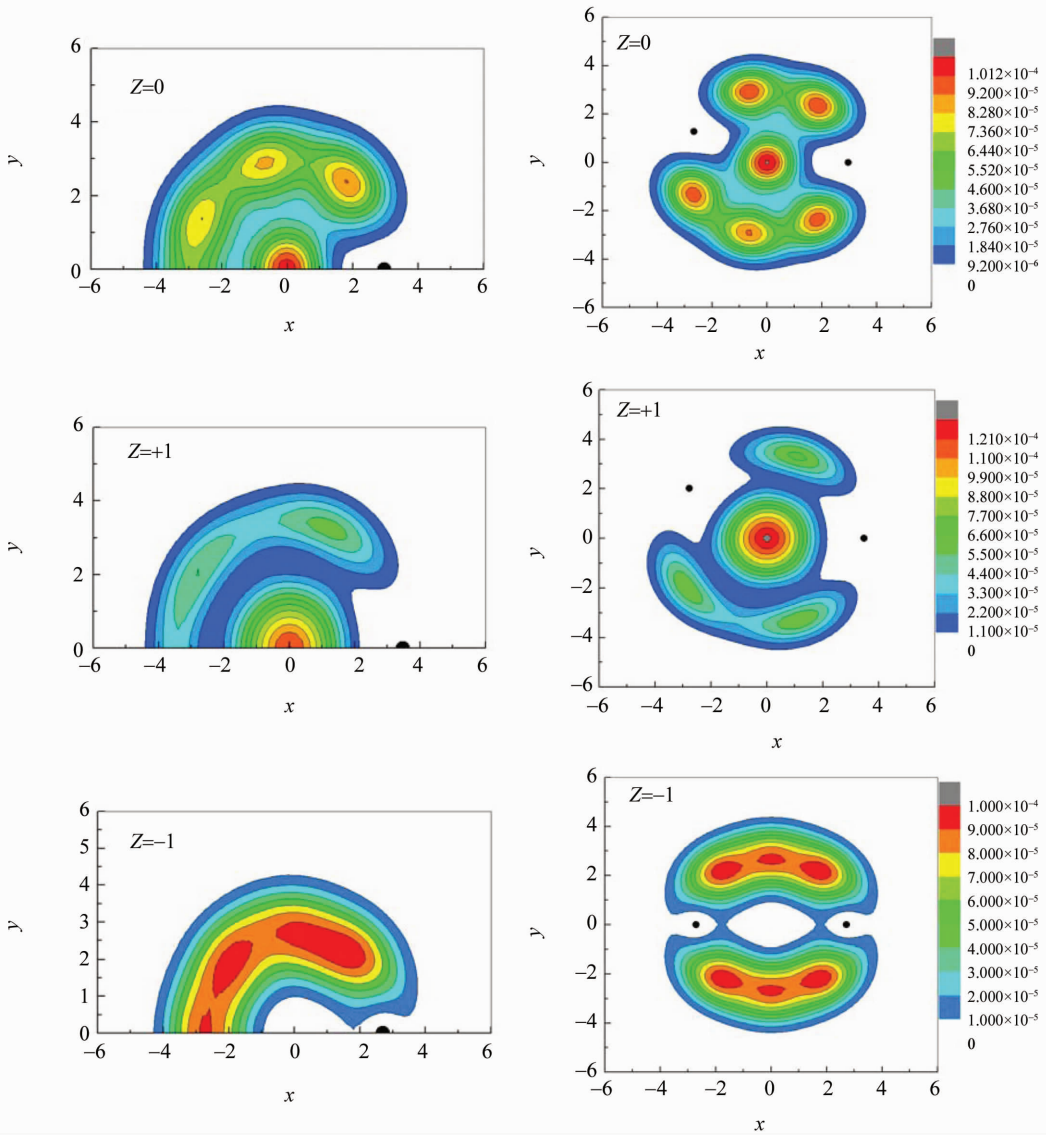


图 3 $L = 63$ 时首态二体、三体密度与掺杂的关系

Fig. 3 $\rho(r_1, r_2)$ and $\rho(r_1, r_2, r_3)$ of the first state versus doping when $L = 63$

为了确切知道正掺杂的电荷迁移情况，计算了 $Z = +1$ 时核心内的有效电子数，并与 $Z = 0$ 的情况进行比较。核心与外环的分界线可以这样标定：从核心到外环之间的极小值所在的位置，即图 2 中对应于 $L = 63$ 、 $Z = 0$ 和 $Z = +1$ 的虚线位置。利用一体密度的数据结果进行计算，得到 $L = 63$ 、 $Z = 0$ 和 $Z = +1$ 两种情况下的核心有效电子数分布，如表 1 所示。

从表 1 的结果可以看出，外磁场对电荷迁移的影响基本可以忽略，引起电荷迁移的主要原因是掺

表 1 磁场及掺杂对核心有效电子数的影响
Table 1 Influence of magnetic field and doping on effective numbers of electrons

参数	$B = 10$ T	$B = 20$ T
$Z = 0$	1.130 9	1.134 4
$Z = +1$	2.943 7	2.932 4

杂。正掺杂时，由于量子点中心有一个对电荷有吸引效用的杂质作用，电子将向中心迁移，因此核心区的有效电子数增加。负掺杂的作用则相反，量子点中心有一个电负性杂质，会将电子排斥出去而形

成空白区。

3 总 结

本文通过计算得到了二维量子点中有极化电子时的电子结构和能级, 分析了外磁场变化和掺杂对量子点电子结构的影响。研究表明: 外磁场变化几乎不影响量子点的电子结构, 掺杂是影响电子结构的主要因素。正掺杂情况下, 由于正杂质的吸

引作用, 使电子的几何分布由 1-7 变成了 3-5, 有更多的电子往核心区聚集; 负掺杂情况下, 由于排斥作用, 使电子的几何分布由 1-7 变成了 0-8, 电子在核心区域不再占居, 而是迁移到外环上。对于核心区域而言, 正掺杂和负掺杂对于电子在该区域的占居形成了两个稳定的状态, 即占居或非占居, 正好对应于二进制的 0 和 1, 期待这种人工量子点能应用到计算机存储和计算上。

参考文献:

- [1] CHAKRABORTY T. Quantum dots [M]. Amsterdam: Elsevier, 1999.
- [2] KUSHHWAHA M S. Plasmons and magnnetoplasmons in semiconductor heterstructures [J]. Surface Science Reports, 2001, 41: 1-416.
- [3] BULJAN M, DESNICA U V, IVANDA M, et al. Formation of three-dimensional quantum dot superlattices in amorphous systems; experiments and Monte Carlo simulations[J]. Phys Rev B, 2009, 79: 035310-1-11.
- [4] OSZWALDOWSKI R, ABRAMAVICIUS D, MUKAMEL S. Many-body effects in two-dimensional optical spectra of semiconductor quantum dot pairs; time-dependent Hartree-Fock approximation and beyond [J]. J Phys Cond Matter, 2008, 20: 045206-1-10.
- [5] HUANG G M, LIU Y M, BAO C G. Variation of core-ring structures of quantum dots and the magic angular momenta in the region of intermediate particle number[J]. Phys Rev B, 2006, 73: 245313-1-8.
- [6] REIMANN M S, MANNINEN M. Electronic structure of quantum dots[J]. Rev Mod Phys, 2002, 74: 1283-1342.
- [7] REIMANN M S, KOSKINEN M, KOLEHMAINEN J, et al. Electronic and magnetic structure of artificial atoms [J]. Eur Phys J D, 1999, 9: 105-110.
- [8] BAO C G, The symmetry background underlying the ring structures for quantum dots and a classification scheme [J]. J Phys Cond Matter, 2002, 14: 8549-8561.
- [9] ZHANG X W, XIA J B. Effects of magnetic field on the electronic structure of wurtzite quantum dots; calculations using effective-mass envelope function theory[J]. Phys Rev B, 2005, 72: 075363-1-8.
- [10] CHUTIA S, BHATTACHARJEE A K. Electronic structure of Mn-doped III-V semiconductor quantum dots [J]. Phys Rev B, 2008, 78: 195311-1-12.
- [11] HUANG G M, LIU Y M, BAO C G. Symmetry constraints and the electronic structures of a quantum dot with thirteen electrons [J]. Phys Rev B, 2003, 68: 165334-0-10.
- [12] HUANG G M, BAO C G. Inspection of the number of electrons in the ring of a quantum dot[J]. China Phys, 2003, 12: 419-425.