

文章编号: 1007-5461(2004)03-0371-05

# 正方体 GaAs 量子点电子特性的数值自洽求解

王建, 邢达

(华南师范大学激光生命科学研究所, 广东 广州 510631)

**摘要:** 采用抛物势作为量子点对电子有效约束势, 使用有限差分法对 Schrödinger-Poisson 方程进行离散化, 根据自旋密度泛函, 进行数值自洽求解, 得到三维正方体 GaAs 量子点电子总基态能、电子密度等电子特性, 并与相同条件 (电子数、自旋、尺寸) 的二维正方形 GaAs 量子点的电子密度进行了对比。

**关键词:** 光电子学; 量子点; 自旋; 密度泛函; 有限差分

**中图分类号:** TN248.4      **文献标识码:** A

## 1 引言

在掺杂调制的异质结中通过金属门电极施加静电势, 可制备出三维受限的量子点 (quantum dot, QD) 半导体结构。由于体积微小, 外部形状可变, 内部电子数可由金属门电压控制, 多电子作用产生的多体效应显示出类似原子的电子结构, 约束势的大小和范围可控导致指定的能级谱, 量子点成为研究诸如三维电子受限、能量量子化以及壳层电子结构的对象。特别地, 有可能利用量子点半导体结构制成高效率激光<sup>[1]</sup>、光谱探测器<sup>[2]</sup>、光存储器、量子信息处理器等, 近年来众多在 AlGaAs/GaAs 材料上完成的基础试验, 显示了实现上述应用的良好前景, 因而量子点系统研究受到很大重视。

理论描述量子点中电子状态成为众多论文的主题, 在低维半导体系统中电子相互作用最适用的是多体理论<sup>[3~5]</sup>, 但其采用二次量子化描述 Hamiltonian, 数学推导较为复杂, 应用并不广泛。文献 [6] 采用变分法研究了在球对称有限势阱约束下的少电子量子点的基态和激发态特性。Matsues<sup>[7]</sup> 通过对非线性 Hartree-Fock-Kohn-Sham 方程引入与两个单粒子状态有关的库仑势, 将其局部线性化后求解, 得到两耦合量子点的电子结构。采用三维球型有限势阱, 以高斯函数为基函数, 求解未加限制的 Hartree-Fock-Roothaan 方程。Dai<sup>[8]</sup> 计算了少电子量子点中的能级, 得到了能级重排的结论。文献 [9] 依据密度泛函理论设计了三维 Schrödinger-Poisson 自洽求解包, 模拟 AlGaAs/GaAs 异质结中嵌入的 InAs 量子点, 未考虑电子自旋。Satyadev<sup>[10]</sup> 指出有必要考虑电子自旋, 这是因为有发现表明, 量子点中电子的壳填充像原子那样遵循 Hund 规则。该文利用自旋密度泛函理论研究了耦合量子点的电子特性。

本文基于自旋密度泛函理论 (SDFT), 考虑了电子自旋对量子点电子结构的影响, 通过有限差分法, 用三维网格表示离散的 Schrödinger-Poisson 方程, 进行数值自洽求解, 得到正方体 GaAs 量子点电子总基态能、电子密度等电子特性, 并与相同条件 (电子数、自旋、尺寸) 的二维正方形 GaAs 量子点的电子密度进行了对比。文章的安排如下: 在第 2 部分介绍研究的量子点模型; 第 3 部分介绍 SDFT 及自洽求解 Schrödinger-Poisson 方程的方法; 有关正方体量子点电子特性的结果在第 4 部分给出; 第 5 部分是结论。

## 2 量子点模型

考虑包含倒立 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 的多层结构, 倒立的半导体异质结生长于 GaAs 基底, 然后是 GaAs

**基金项目:** 本课题受国家重大基础前期研究专项 (2002CCC00400) 和广东省自然科学基金团队项目 (015012) 资助

**收稿日期:** 2003-06-12; **修改日期:** 2003-07-18

**E-mail:** rogerjwang@21cn.com

盖层, 两者的掺杂浓度均为  $10^{18}\text{cm}^{-3}$ , 在 GaAs 中介电常数  $\varepsilon = 12.9$ , 有效质量  $m^* = 0.067m_e$ 。可施加电压以控制量子点电子数的金属门在整个装置的最上层。在异质结界面约束电子形成 2D 电子气, 并通过侧面约束形成的正方体量子点, 其边长可调。对于大多数量子点而言, 抛物势是其束缚电子的一个很好近似<sup>[7]</sup>, 本文选择三维抛物势作为量子点的约束势, 不再考虑门电极产生的约束势和导带张力势。

### 3 方 法

在处理电子与电子间的相互作用时, 采用自旋密度泛函理论 (SDFT), 它是由 Hohenberg, Kohn 和 Sham 建立的密度泛函理论<sup>[11]</sup>的推广。密度泛函理论将多电子相互作用转化为交换和相关势, 在该有效势作用下的得出非相互作用的单电子方程形式。自旋密度泛函理论则在交换和相关势中引入自旋, 使之不是电荷密度的函数, 而且是自旋极化参数的函数, 提供了对交换和相关的更为普遍的近似<sup>[12]</sup>。

量子点中静电势能可由 Poisson 方程描述<sup>[13]</sup>:

$$\nabla \cdot \varepsilon \nabla \Phi = -q[N_D(r) - n(r)], \quad (1)$$

$\Phi$  为静电势,  $q$  为电子电荷,  $\varepsilon$  为介电常数,  $N_D$  为离子化施主浓度,  $n$  为电子浓度, 相应与量子点中电子数的电子浓度为

$$n(r, s) = \sum_k |\Psi_k(r, s)|^2 \quad (2)$$

$\Psi_k$  是第  $k$  个 Schrödinger 方程的特征函数,  $s$  表示自旋, 下文中采用的  $\uparrow$ 、 $\downarrow$  符号表示向上和向下自旋。由式 (1) 得到的静电势将加入到考虑自旋的 Schrödinger 方程, 而这时的 Schrödinger 方程须计算两次, 一次是对于自旋向上 ( $\uparrow$ ), 一次是对于自旋向下 ( $\downarrow$ ), Hamiltonian 式中只是交换和相关势  $V_{sc}^{\uparrow(\downarrow)}$  不同, 如 (3) 式所示。

$$V_{sc}^{\uparrow(\downarrow)} = \frac{d[n\varepsilon_{sc}(n, \zeta)]}{dn^{\uparrow(\downarrow)}}, \quad (3)$$

$$\text{其中 } n(r) \text{ 为总电子密度, } \quad n(r) = n^{\uparrow}(r) + n^{\downarrow}(r), \quad (4)$$

$$\zeta \text{ 定义为自旋极化度, } \quad \zeta = \frac{n^{\uparrow}(r) - n^{\downarrow}(r)}{n(r)}, \quad (5)$$

$\varepsilon_{sc}(n, \zeta)$  是总电子密度  $n(r)$  函数的交换相关能量, 可以被分解为交换和相关两部分能,

$$\varepsilon_{sc}(n, \zeta) = \varepsilon_x(n, \zeta) + \varepsilon_c(n, \zeta). \quad (6)$$

根据文献 [14],  $\varepsilon_{sc}(n, \zeta)$  的相关势部分在自旋行为中只起轻微的作用, 为简化起见, 本文忽略这一部分不计, 该文献有电子自旋相关项的详细描述。采用文献 [10], 得到交换项的表示

$$\varepsilon_x(n, \zeta) = -\frac{3}{4} \left( \frac{3}{\pi} n(r) \right)^{1/3} [1 + f(\zeta)], \quad (7)$$

$$\text{其中 } f(\zeta) = \frac{(1 + \zeta)^{4/3} + (1 - \zeta)^{4/3} - 2}{2}. \quad (8)$$

因此对于含自旋电子的 Hamiltonian  $H^{\uparrow(\downarrow)}$  为

$$\hat{H}^{\uparrow(\downarrow)} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left[ \frac{1}{m^*(r)} \nabla \right] + V(r) + V_{sc}^{\uparrow(\downarrow)}, \quad (9)$$

势能  $V(\mathbf{r})$  可表示为  $V(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r})$ ,  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  为外部施加给量子点的约束势, 这里同文献 [15], 取为抛物势

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m^*\omega_0^2r^2, \tag{10}$$

其中  $\hbar\omega_0$  称为约束强度.  $V_H = -q\phi(\mathbf{r})$  是 Hartree 势.

系统的总基态能量为 [14]

$$E_{\text{tot}}(n, s) = \sum_{k,s} \mu_{k,s} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' - \sum_s \int n_s(\mathbf{r})V_{sc,s}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \epsilon_{sc,s}. \tag{11}$$

为了得到量子点中的电子状态, 需要自治求解 Schrödinger-Poisson 方程, 首先求解含有向上和向下自旋的 Schrödinger 方程, 得出各自的电子密度和交换相关能, 再求解 Poisson 方程确定静电势能. 重复上述过程直至收敛, 收敛标准为相临两次迭代的特征能量的范数小于  $10^{-6}\text{eV}$ . 求解 Schrödinger 及 Poisson 方程时, 先采用有限差分法, 在  $x, y, z$  方向建立统一正交三维网格, 静电势、波函数、电子密度等的值均在格点上定义, 用二阶导数近似两方程中的 Laplacian 算符, 正方体的形状保证了通过有限差分法离散后得到实对称矩阵. Schrödinger 方程的特征能量和特征函数 (波函数) 可由 Jacobi 方法求出 [16], 在边界处波函数为零. Poisson 方程采用阻尼 Jacobi 方法求解, 边界处静电势为零.

### 4 结 果

取约束强度  $\hbar\omega_0 = 20 \text{ meV}$ , 改变 GaAs 量子点的外部尺寸, 从 4 nm 逐渐增大, 得到在相同电子数和自旋 (4 个, 2 个向上自旋, 2 个向下自旋) 下基态总能量, 如表 1 所示. 从中可知随着量子点尺寸大, 总基态能量减小.

**Table 1 Total energy of ground state as a function of GaAs QD size subjected to the same electron numbers and spin**

尺寸 (nm)	4	6	8	10	12
总能量 (eV)	1.5844	1.3127	0.5978	0.5261	0.4048

表 2 给出在外部尺寸为 8 nm, 不同约束强度  $\hbar\omega_0$  下,  $\hbar\omega_0$  的单位为 meV, 作为所含电子数目及自旋方式函数的总基态能量的变化规律,  $\uparrow, \downarrow$  符号旁的数字表示自旋的电子数目.

**Table 2 The total energy of ground state of cube GaAs QD subjected to different confinement potential, numbers and spin**

电子数目 总基态 $\hbar\omega_0$ 能量 (meV)	2	3	4	5	6	7
	(1 $\uparrow$ , 1 $\downarrow$ )	(2 $\uparrow$ , 1 $\downarrow$ )	(3 $\uparrow$ , 1 $\downarrow$ )	(3 $\uparrow$ , 2 $\downarrow$ )	(3 $\uparrow$ , 3 $\downarrow$ )	(4 $\uparrow$ , 3 $\downarrow$ )
10	0.1861	0.3744	0.5556	0.7356	0.9115	1.0846
20	0.1897	0.3796	0.5642	0.7478	0.9257	1.1008
40	0.2028	0.4029	0.5978	0.7892	0.9768	1.1570

从表 2 中可知总基态能量随电子数目  $N$  的增加而单调增加, 约束强度增大, 相应的总基态能增大, 对应相同的电子数目和自旋, 约束能量越大, 总基态能越大, 并且在同一约束强度下, 随着电子数目  $N$  的增加, 相邻两项的总基态能之差递减. 对照表 1 和表 2, 当量子点尺寸为 8 nm, 约束强度  $\hbar\omega_0 = 20 \text{ meV}$  总电子数为 4 时, 两个电子自旋向上、两个电子自旋向下的总能量大于 3 个电子自旋向上的总能量, 这意味着出现电子自旋极化现象, 满足 Hund 定律, 即部分填充的壳层存在自旋极化.

图 1 给出经过含两个自旋方向相反电子的正方体 GaAs 量子点中心  $x-y$  平面的电子密度分布, 可见对应平面中心点处电子密度最大, 这一结果同于相同条件 (电子数、自旋、尺寸) 的二维正方形 GaAs 量子点情形。而当电子数为其它值等时两者的电子密度相差较大, 图 2 给出  $N = 12$ , 6 个向上自旋, 6 个向下自旋的三维、二维 GaAs 量子点电子密度比较。

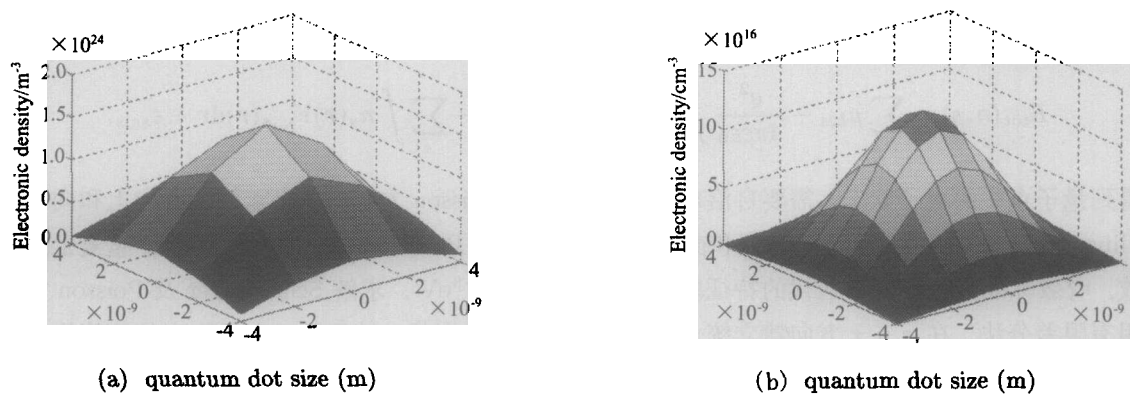


Fig.1 The electron density of 2 electrons with opposite spin in the  $x-y$  plane through the center of the cube (a) and square (b) GaAs QD

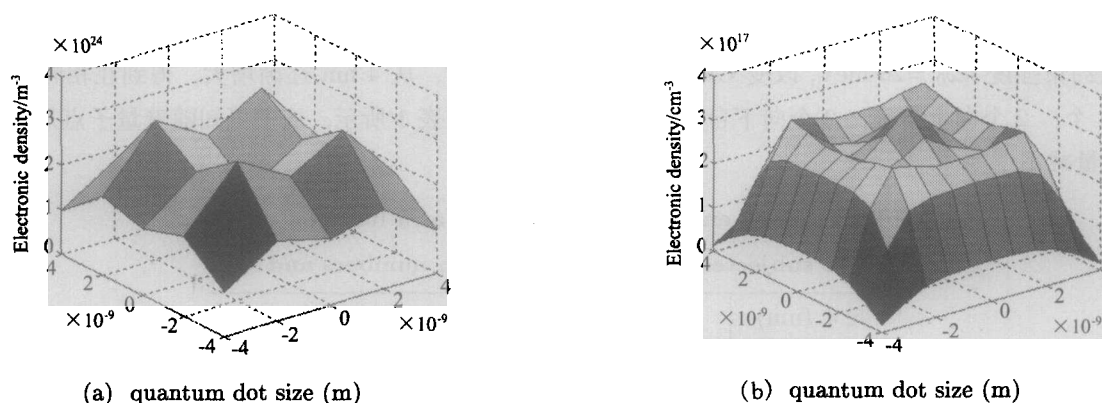


Fig.2 The electron density of 12 electrons with same conditions (number, spin, length) in the  $x-y$  plane through the center of the cube (a) and square (b) GaAs QD

## 4 结 论

本文基于自旋密度泛函理论 (SDFT), 选取抛物势作为 GaAs 量子点有效约束势, 通过有限差分法, 得到离散 Schrödinger-Poisson 方程的三维网格表示, 并进行自洽求解, 得到正方体量子点电子总基态能、电子密度等电子特性, 并与相同条件 (电子数、自旋、尺寸) 的二维正方形 GaAs 量子点的电子密度进行了对比。

### 参考文献:

- [1] Marsh J H, et al. Engineering quantum-dot lasers [J]. *Physica E*, 2000, 8: 154-163.
- [2] Fiore A, et al. High-efficiency light-emitting diodes at using InAs-InGaAs quantum dots [J]. *IEEE Photonics Technology Lett.*, 2000, 1.12(12): 1601-1603.

- [3] Inkson. *Many Body Theory of Solids—an Introduction* [M]. New York: Plenum Press, 1986. 10-108.
- [4] Indlekofer M K, *et al.* A model for many-body interaction effects in open quantum dot systems [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2003, 15, 147-158.
- [5] Bednarek S, Szafran B, Adamowski. Many-electron artificial atoms [J]. *Physical Review B*, 1999, 59(20): 13036-13042.
- [6] Szafran B, Adamowski J, Bednark S. Ground and excited states of few-electron systems in spherical quantum dots [J]. *Physica E*, 1999, 4: 1-10.
- [7] Matsuse T, *et al.* Electronic structures in coupled two quantum dots by 3D-mesh hartree-fock-kohn-sham calculation [J]. *The European Physical Journal D*, 2001, 16: 391-394.
- [8] Dai Zhenhong, *et al.* Electron states of few-electron quantum dots [J]. *Chinese Physics Lett.*, 2002, 19(1): 117-119.
- [9] Coli P, Iannaccone G. Modelling of self-organized InAs quantum dots embedded in an AlGaAs/GaAs heterostructure [J]. *Nanotechnology*, 2002, 13, 263-266.
- [10] Nagaraja S, Leburton J P, Martin R M. Electronic properties and spin polarization in coupled quantum dots [J]. *Physical Review B*, 1999, 60(12): 8759-8766.
- [11] Li Mingfu. *Physics of Semiconductor* (半导体物理) [M]. Beijing: Science Press, 1991. 22-24 (in Chinese).
- [12] Fonseca C R L, *et al.* Self-consistent calculation of the electronic structure and electron-electron interaction in self-assembled InAs-GaAs quantum dot structures [J]. *Physical Review B*, 1997, 57(7): 4017-4016.
- [13] Snider G L, Tan H I, Hu E L. Electron states in mesa-etched one-dimensional quantum well wires [J]. *Journal of Applied Physics*, 1990, 68(6): 2849-2853
- [14] Berggren F K, Yakimenko I I, Bychkov M A. On the role of electron exchange and correlation in semiconductor quantum dots [J]. *Nanotechnology*, 2001, 12, 529-532.
- [15] Saarikoski H, *et al.* Electronic properties of model quantum-dot structures in zero and finite magnetic fields [J]. *The European Physical Journal B*, 2002, 26: 241-252.
- [16] Deng Jianzhong, Ge Renjie, Cheng Zhengxing. *Computational Method* (计算方法)[M]. Xi'an: Xi'an Jiao Tong University Press, 1985. 120-200 (in Chinese).

## Self-consistent calculation of the electronic properties of the cube quantum dot

WANG Jian, XING Da

( Institute of Laser Life Sciences, South China Normal University, Guangzhou 510631, China )

**Abstract:** Using the parabolic potential as confinement potential in quantum dot and using a finite difference method to discrete the Schrödinger-Poisson equations, an numerical self-consistent solution of three-dimension cube GaAs quantum dot is carried out based on spin-density-functional theory (SDFT). The electronic properties such as total ground state electronic energy, electron density are obtained, and a comparison with the electron density of the two-dimension square GaAs QD with same condition (electron number, spin, length) is hold.

**Key words:** optoelectronics; quantum dot; spin; density-functional theory; finite-difference

**作者简介:** 王 建 (1968 -), 男, 华南师范大学博士后, 主要从事量子点、量子点激光器光电特性及其优化控制研究。