第29卷 第3期
2005年3月

高能物理与核物理
HIGH ENERGY PHYSICS AND NUCLEAR PHYSICS

Vol.29, No.3
Mar., 2005

一种透镜形人造原子的能级结构及电子波函数*

侯春风[1)] 郭汝海 孙秀冬
(哈尔滨工业大学物理系 哈尔滨 150001)

摘要 对一种透镜形人造原子的Schrödinger方程进行了求解,给出了人造原子能级结构所满足的关系式及电子波函数,并对这种人造原子的Rydberg态进行了着重的讨论.

关键词 人造原子 量子点 能级 波函数

目前人们已经能够制造出纳米尺度的、只含有少数电子的金属或半导体微结构.在这种微结构中,电子被局限在一个很小的区域内,其运动行为与宏观金属或半导体中的电子的行为完全不同,而是类似于原子中的电子,具有明显的量子效应.因此人们通常把这种人工微结构称为“人造原子”或“量子点”[1,2].由于人造原子在众多的光电子及微电子器件中具有广阔的潜在应用前景,因此引起了人们的极大兴趣.

迄今,人们已经提出了多种不同形状的人造原子模型.Inoshita等人[3]利用自洽局域密度函数法对球形半导体人造原子的电子结构进行了数值计算;Tarucha等人[4]和Kouwenhoven等人[5]研究了圆柱形人造原子的基态和激发态.此外,人造原子还通常被看作金字塔形[6—9],这是近年来人们普遍采用的一种人造原子模型.然而,一些实验表明,人们利用外延生长技术制备出的自组装量子点实际上更接近于透镜形[10—12].最近,Pei等人[13]利用三维有限元方法研究了自组装透镜形量子点阵列中的弹性场.这里,将提出一种可解析求解的透镜形人造原子模型.在我们的模型中,电子被限制在两个开口相反的共焦旋转抛物面围成的透镜形区域中.由于在直角坐标系中该透镜形人造原子模型的边界条件比较复杂,难以求解,所以在本文中将采用旋转抛物面坐标系,对透镜形人造原子进行求解,给出电子能级所满足的方程及相应的波函数.此外,还将给出高激发态即Rydberg态能级的显式表达式.

这里采用旋转抛物面坐标(ξ,η,ϕ),它们与直角坐标(x,y,z)具有如下关系[14]:

$$x=\xi\eta\cos\phi,\ y=\xi\eta\sin\phi,\ z=\frac{1}{2}(\xi^2-\eta^2)\ , \tag{1}$$

其中ϕ代表绕z轴旋转的角度.在该旋转抛物面坐标系中,ξ等于常数表示以z轴为旋转对称轴且开口向下的旋转抛物面,η等于常数表示以z轴为旋转对称轴且开口向上的旋转抛物面.在这种坐标系中Laplace算子的形式为

$$\nabla^2=\frac{1}{\xi^2+\eta^2}\Big[\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\Big(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\Big)+\frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\Big(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big)+\Big(\frac{1}{\xi^2}+\frac{1}{\eta^2}\Big)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big]\ . \tag{2}$$

我们的模型可归结为求解如下Schrödinger方程

$$\Big\{-\frac{\hbar^2}{2\mu(\xi^2+\eta^2)}\Big[\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\Big(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\Big)+\frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\Big(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big)+\Big(\frac{1}{\xi^2}+\frac{1}{\eta^2}\Big)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big]+V(\xi,\eta,\phi)\Big\}\psi=E\psi, \tag{3}$$

其中

$$V(\xi,\eta,\phi)=\begin{cases}0, 0\leqslant\xi<p, 0\leqslant\eta<q\\ \infty, \text{otherwise}\end{cases}\ , \tag{4}$$

μ为电子质量,p和q为两个与人造原子的形状和大小有关的常数,可根据具体情况来选取.

根据势函数的特点可知,在$\xi>p$或$\eta>q$的情

2004-06-15 收稿
* 国家自然科学基金(90201003)资助
1) E-mail: houchunfeng@hit.edu.cn

况下,应有 $\psi=0$.下面来求当 $0\leqslant\xi<p$, $0\leqslant\eta<q$ 时方程(3)的解,此时方程(3)的形式为

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\partial\psi}{\partial\xi}+\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2}+\frac{1}{\eta}\frac{\partial\psi}{\partial\eta}+\left(\frac{1}{\xi^2}+\frac{1}{\eta^2}\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}(\xi^2+\eta^2)\psi=0\ . \tag{5}$$

方程(5)可分离变量,把

$$\psi(\xi,\eta,\phi)=f_1(\xi)f_2(\eta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}\quad(m=0,\pm1,\pm2,\cdots), \tag{6}$$

代入方程(5),可得

$$\frac{f_1''}{f_1}+\frac{1}{\xi}\frac{f_1'}{f_1}+\frac{f_2''}{f_2}+\frac{1}{\eta}\frac{f_2'}{f_2}-m^2\left(\frac{1}{\xi^2}+\frac{1}{\eta^2}\right)+\frac{2\mu E}{\hbar^2}(\xi^2+\eta^2)=0\ . \tag{7}$$

由方程(7)可知

$$\frac{f_1''}{f_1}+\frac{1}{\xi}\frac{f_1'}{f_1}-\frac{m^2}{\xi^2}+k^2\xi=\beta\ , \tag{8a}$$

$$\frac{f_2''}{f_2}+\frac{1}{\eta}\frac{f_2'}{f_2}-\frac{m^2}{\eta^2}+k^2\eta=-\beta\ , \tag{8b}$$

即

$$f_1''+\frac{f_1'}{\xi}+\left(k^2\xi^2-\beta-\frac{m^2}{\xi^2}\right)f_1=0\ , \tag{9a}$$

$$f_2''+\frac{f_2'}{\eta}+\left(k^2\eta^2+\beta-\frac{m^2}{\eta^2}\right)f_2=0\ , \tag{9b}$$

其中 $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}$,β 为一待定常数.作代换

$$f_1=\xi^{|m|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\xi^2/2}g_1, \tag{10a}$$

$$f_2=\eta^{|m|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\eta^2/2}g_2, \tag{10b}$$

则方程(9a)和(9b)可变为

$$g_1''+\left(\frac{2|m|+1}{\xi}+2\mathrm{i}k\xi\right)g_1'+[2\mathrm{i}k(|m|+1)-\beta]g_1=0\ , \tag{11a}$$

$$g_2''+\left(\frac{2|m|+1}{\eta}+2\mathrm{i}k\eta\right)g_2'+[2\mathrm{i}k(|m|+1)+\beta]g_2=0\ . \tag{11b}$$

作变量代换:$u=-\mathrm{i}k\xi^2$, $v=-\mathrm{i}k\eta^2$,则方程(11a)和(11b)可化为

$$u\frac{\mathrm{d}^2g_1}{\mathrm{d}u^2}+[(|m|+1)-u]\frac{\mathrm{d}g_1}{\mathrm{d}u}-\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)g_1=0\ , \tag{12a}$$

$$v\frac{\mathrm{d}^2g_2}{\mathrm{d}v^2}+[(|m|+1)-v]\frac{\mathrm{d}g_2}{\mathrm{d}v}-\left(\frac{|m|+1}{2}-\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)g_2=0\ . \tag{12b}$$

方程(12a)和(12b)为合流超几何方程,其在物理上允许的解为

$$g_1=F\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}k\xi^2\right), \tag{13a}$$

$$g_2=F\left(\frac{|m|+1}{2}-\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}k\eta^2\right). \tag{13b}$$

根据上述两式及(6),(10a)和(10b)式可知,在我们的人造原子模型中电子的波函数为

$$\psi(\xi,\eta,\phi)=(\xi\eta)^{|m|}\mathrm{e}^{[\mathrm{i}k(\xi^2+\eta^2)/2+\mathrm{i}m\phi]}\times F\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}k\xi^2\right)\times F\left(\frac{|m|+1}{2}-\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}k\eta^2\right). \tag{14}$$

利用边界条件 $\psi|_{\xi=p}=0$ 及 $\psi|_{\eta=q}=0$ 有

$$F\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}kp^2\right)=0\ , \tag{15a}$$

$$F\left(\frac{|m|+1}{2}-\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}kq^2\right)=0\ . \tag{15b}$$

利用以上两式,即可以求出待定参数 β 和电子的能量 E.在某些特殊情况下,(15a)和(15b)式还可以简化为更简单的形式.

当 $-3\pi/2<\arg z<\pi/2$ 时,合流超几何函数可渐近地表示为[14]

$$F(\alpha,\gamma,z)\sim\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\pi}z^{-\alpha}\times\left[1+\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\frac{(\alpha)_n(1-\gamma+\alpha)_n}{n!\ z^n}\right]+\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}\mathrm{e}^z z^{\alpha-\gamma}\left[1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\gamma-\alpha)_n(1-\alpha)_n}{n!\ z^n}\right]\ . \tag{16}$$

对于纯虚数 z,且当 $|z|$ 很大时,上式可以转化为[15, 16]

$$F(\alpha,\gamma,z)\sim\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}|z|^{-\alpha}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\alpha\right)+\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}|z|^{\alpha-\gamma}\mathrm{e}^z\exp\left[-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(\alpha-\gamma)\right]\ . \tag{17}$$

根据(17)式,当 k 很大时,即对于高激发态有

$$F\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}kp^2\right)\sim\frac{\Gamma(|m|+1)}{\Gamma\left(\frac{|m|+1}{2}-\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)}\times(kp^2)^{-(|m|+1+\mathrm{i}\beta/2k)/2}\exp\left[\frac{\pi\beta}{8k}-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}(|m|+1)\right]+\frac{\Gamma(|m|+1)}{\Gamma\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)}(kp^2)^{-(|m|+1-\mathrm{i}\beta/2k)/2}\times\exp\left[\frac{\pi\beta}{8k}-\mathrm{i}kp^2+\mathrm{i}\frac{\pi}{4}(|m|+1)\right]. \tag{18}$$

令

$$\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)=\left|\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)\right|\exp(\mathrm{i}\delta)\ , \tag{19}$$

其中

$$\delta=\arg\left(\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}+\mathrm{i}\frac{\beta}{4k}\right)\right)\ . \tag{20}$$

代表辐角,则可知

$$\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}-\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)=\left|\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)\right|\exp(-\mathrm{i}\delta)\ . \tag{21}$$

把(19)和(21)式代入(18)式有

$$\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k},|m|+1,-\mathrm{i}kp^2\right)\sim \frac{\Gamma(|m|+1)}{\left|\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)\right|(kp^2)^{(|m|+1)/2}}\exp\left(\frac{\pi\beta}{8k}-\frac{\mathrm{i}kp^2}{2}\right)\times \left\{\exp\left[\frac{\mathrm{i}kp^2}{2}-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}(|m|+1)-\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\ln(kp^2)+\mathrm{i}\delta\right]+\exp\left[-\frac{\mathrm{i}kp^2}{2}+\mathrm{i}\frac{\pi}{4}(|m|+1)+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\ln(kp^2)-\mathrm{i}\delta\right]\right\}= \frac{2\Gamma(|m|+1)}{\left|\Gamma\left(\frac{(|m|+1)}{2}+\frac{\mathrm{i}\beta}{4k}\right)\right|(kp^2)^{(|m|+1)/2}}\exp\left(\frac{\pi\beta}{8k}-\frac{\mathrm{i}kp^2}{2}\right)\times \cos\left[\frac{kp^2}{2}-\frac{\pi}{4}(|m|+1)-\frac{\beta}{4k}\ln(kp^2)+\delta\right]\ . \tag{22}$$

根据(22)式和(15a)式可知

$$\cos\left[\frac{kp^2}{2}-\frac{\pi}{4}(|m|+1)-\frac{\beta}{4k}\ln(kp^2)+\delta\right]=0\ , \tag{23}$$

即

$$\frac{kp^2}{2}-\frac{\pi}{4}(|m|+1)-\frac{\beta}{4k}\ln(kp^2)+\delta=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\pi\ . \tag{24a}$$

同理,由(15b)可得

$$\frac{kq^2}{2}-\frac{\pi}{4}(|m|+1)+\frac{\beta}{4k}\ln(kq^2)-\delta=\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\pi\ . \tag{24b}$$

对于高激发态,n_1 和 n_2 应该是大的整数.由(24a)和(24b)式可知,这里的人造原子的高激发态即 Rydberg 态能级满足

$$\frac{p^2\sqrt{\mu E_{n_1,n_2}/2}}{\hbar}-\frac{\pi}{2}(|m|+1)-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2\mu E_{n_1,n_2}}}\ln\left(\frac{p^2\sqrt{2\mu E_{n_1,n_2}}}{2\hbar}\right)+2\arg\left(\Gamma\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\hbar\beta}{2\sqrt{2\mu E_{n_1,n_2}}}\right)\right)=(2n_1+1)\pi\ , \tag{25a}$$

和

$$\frac{q^2\sqrt{\mu E_{n_1,n_2}/2}}{\hbar}-\frac{\pi}{2}(|m|+1)+\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2\mu E_{n_1,n_2}}}\ln\left(\frac{q^2\sqrt{2\mu E_{n_1,n_2}}}{2\hbar}\right)-2\arg\left(\Gamma\left(\frac{|m|+1}{2}+\frac{\mathrm{i}\hbar\beta}{2\sqrt{2\mu E_{n_1,n_2}}}\right)\right)=(2n_2+1)\pi\ . \tag{25b}$$

利用(25a)和(25b)式即可求出透镜形人造原子的 Rydberg 态能级.特别是当 $p=q$,即当这种透镜形人造原子的上、下两个表面关于 $z=0$ 平面相互对称时,其 Rydberg 态能级满足如下简单表达式

$$E_{n_1,n_2}=\frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu p^4}\left(n_1+n_2+\frac{|m|+3}{2}\right)^2. \tag{26}$$

综上所述,这里利用一种旋转抛物面坐标系对由两个开口相反的共焦旋转抛物面围成的硬壁透镜形人造原子模型进行了求解,给出了人造原子能级结构所满足的关系式及电子波函数,并对这种人造原子的 Rydberg 态进行了着重的讨论.

参考文献(References)

1 Kastner M A. Phys. Today, 1993, **46**: 24

2 Bimberg D, Grundmann M, Ledentsov N N. Quantum Dot Hetersructures. New York: Wiely, 1998

3 Inoshita T, Ohnishi S, Oshiyama A. Phys. Rev. Lett., 1986, **57**: 2560

4 Tarucha S et al. Phys. Rev. Lett., 1996, **77**: 3613

5 Kouwenhoven L P et al. Science, 1997, **278**: 1784

6 Ruvimov S et al. Phys. Rev., 1995, **B51**: 14766

7 Pryor C. Phys. Rev., 1998, **B57**: 7190

8 Kim J Y, Seok J H. Mat. Sci. and Eng., 2002, **B89**: 176

9 Sheng W, Leburton J-P. Phys. Rev., 2003, **B67**: 125308

10 Mui D S L et al. Appl. Phys. Lett., 1995, **66**: 1620

11 Fry P W et al. Phys. Rev. Lett., 2000, **84**: 733

12 Heidemeyer H et al. Phys. Rev. Lett., 2003, **91**: 196103

13 PEI Q X, LU C, WANG Y Y. J. Appl. Phys., 2003, **93**: 1487

14 WANG Z X, GUO D R. Introduction to Special Function. Beijing: Peking University Press, 2000. 306 (in Chinese)
(王竹溪,郭敦仁. 特殊函数概论. 北京:北京大学出版社,2000. 306)

15 Morse P M, Feshbach H. Methods of Theoretical Physics. New York: McGraw Hill, 1953. 611

16 ZENG J Y. Quantum Mechanics, Third Edition, Vol Ⅱ. Beijing: Science Press, 2000. 571 (in Chinese)
(曾谨言. 量子力学,第三版,卷Ⅱ. 北京:科学出版社, 2000. 571)

Energy Levels and Electron Wave-Functions of a Type of Lens-Shaped Artificial Atom*

HOU Chun-Feng[1)] GUO Ru-Hai SUN Xiu-Dong
(Department of Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract The Schrödinger equation for a type of artificial atom is solved, the expressions for the energy levels and the electron wave functions of this type of artificial atom are presented, and the Rydberg states of the artificial atom are also discussed in detail.

Key words artificial atom, quantum dot, energy level, wave function

Received 15 June 2004
* Supported by National Natural Science Foundation of China (90201003)
1) E-mail: houchunfeng@hit.edu.cn