

文章编号 1004-924X(2013)06-1472-07

应变对耦合量子点空穴基态混合特性的影响

汤乃云

(上海电力学院 电子科学与技术系, 上海 200090)

摘要:考虑应变对量子点结构产生的重要影响,采用六带 K·P 理论模型计算了耦合量子点系统在不同耦合距离下空穴基态及激发态的能态特性,探讨了应变效应对耦合量子点空穴基态反成键态特性的影响。计算结果表明,单轴应变对量子点的空穴能带有主要影响:首先它使重空穴(HH),轻空穴(LH)能级分裂增加,减少了 HH,LH 的混合;同时,改变了 LH 的束缚势垒,使得空穴基态波函数较多局限在底部量子点中。在不考虑应变的情况下,随着量子点之间耦合强度的减小,价带基态能级和激发态能级发生反交叉现象,基态从成键态翻转为反成键态。应变效应使得量子点的重空穴及轻空穴的能带发生改变,轻重空穴耦合减弱,基态和激发态之间发生成键、反成键态翻转的临界距离明显减小。

关键词:耦合量子点;应变;反键态;六带 K·P 理论

中图分类号:O471.4;O471.1 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/OPE.20132106.1472

Effect of strain on formation of antibonding hole ground states in InAs quantum dots

TANG Nai-yun

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

* *Corresponding author, E-mail: naiyun@mail.sitp.ac.cn*

Abstract: In consideration of the effect of consequent elastic strain due to the lattice mismatch on the electronic structures of Quantum Dots (QDs), a six-band K·P model was used to explore the two lowest single-particle hole states in two vertically Coupled InAs/GaAs QDs (CQDs). The elastic strain due to the lattice mismatch between InAs and GaAs was included in the calculations. The theoretical results indicate that uniaxial strain effects play a dominant role in the band offset and they affect the hole states of the coupled dot system. First, it increases the splitting energy between the heavy-hole (HH) and light-hole (LH) levels and reduces the mixing of HH and LH. Simultaneously, the strain in the dot molecule affects the potential distribution of CQDs, inducing more ground states are confined on the bottom dots. Compared to the case without strain effect, the critical distance between QDs is reduced to about 2 nm, by which the hole ground states are anti-bonding-like. Therefore, the strain effects in the CQDs change the potential distribution, weaken the coupling strength between HH and LH and reduce the critical inter-dot distance.

Key words: coupled quantum dot; strain; antibonding ground-state; six-band K·P model

收稿日期:2013-01-31;修订日期:2013-03-05.

基金项目:上海市自然科学基金资助项目(No. B10ZR1412400);国家自然科学基金资助项目(No. 61204105)

1 引言

半导体量子点和量子线体系由于在固态量子计算和量子信息方面具有潜在的物理优势而受到极大关注,其中耦合量子点因其电子结构的可调性成为研究热点^[1-4]。为了完成大规模的固态量子计算,必须要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,即改变耦合量子点间成键强度及特性可用于量子计算、量子光学等,同时可用于揭示真实分子的一些物理特性,故低维耦合量子体系,特别是量子点分子中电子或空穴量子态的研究及其在电磁场下的量子调控成为研究热点。目前,量子点分子的研究方向均侧重于 InGaAs/GaAs 量子点的类 P 态的基态反键特性研究,对其机理的研究目前集中于使用 K·P 理论。但是到目前为止,大部分用 K·P 理论研究量子点基态特性时都忽略了应变效应^[5-8]。尽管 Jaskolski 等研究了应变对耦合量子点体系导带和价带带边势能及各自能级的影响,但是其未详细研究空穴反键态的作用^[9]。量子

点材料的晶格失配,应变对量子点结构有重要影响,特别是有报道称单轴应变对量子点的空穴能带有主要影响,故本文主要采用 6 带 K·P 理论研究了应变对 InAs/GaAs 量子点空穴反键特性的作用。

2 计算模型

如图 1(a)中插图所示,本文计算使用的耦合体系为垂直耦合 InAs/GaAs 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 $h=4$ nm 和直径 $R=15$ nm,量子点间距为 d ,在 0.5~6 nm 内变化,对应量子点间的耦合强度由强到弱。计算过程中,材料各常数采用文献报道^[10]。

在计算中采用 6 带 K·P 模型。哈密顿的表达式如下^[11]:

$$\mathbf{H}=\mathbf{H}_{\text{Vv}}+\mathbf{H}_{\text{strain}}+\mathbf{H}_{\text{SO}}+\mathbf{U}, \quad (1)$$

其中: \mathbf{H}_{Vv} 为波矢相关项, \mathbf{H}_{SO} 为自旋轨道相互作用项, $\mathbf{H}_{\text{strain}}$ 为应变项, \mathbf{U} 为 InAs/GaAs 材料的平均价带带阶。通过布洛赫波展开,系统的 6×6 K·P 哈密顿量为:

$$\mathbf{H}_{\text{Vv}}=\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} [Lk_x^2+M(k_y^2+k_z^2)]\mathbf{l} & Nk_xk_y\mathbf{l} & Nk_xk_z\mathbf{l} \\ Nk_xk_y\mathbf{l} & [Lk_y^2+M(k_x^2+k_z^2)]\mathbf{l} & Nk_yk_z\mathbf{l} \\ Nk_xk_z\mathbf{l} & Nk_yk_z\mathbf{l} & [Lk_z^2+M(k_x^2+k_y^2)]\mathbf{l} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

其中: m_0 为自由电子质量, \mathbf{l} 为 2×2 矩阵。同时,

$$L=-(\gamma_1+4\gamma_2), \quad (3)$$

$$M=-(\gamma_1-2\gamma_2), \quad (4)$$

$$L=-6\gamma_3, \quad (5)$$

其中: γ_i 是 Luttinger 常数。

哈密顿量中 \mathbf{H}_{SO} 项的表达式为:

$$\mathbf{H}_{\text{SO}}=\frac{\Delta_0}{3} \begin{bmatrix} -l & i\sigma_z & i\sigma_y \\ i\sigma_z & -l & i\sigma_x \\ i\sigma_y & i\sigma_x & -l \end{bmatrix}, \quad (6)$$

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 $\mathbf{H}_{\text{strain}}$ 的表达式为:

$$\mathbf{H}_{\text{strain}}=\begin{bmatrix} [k_{xx}+m(\epsilon_{yy}+\epsilon_{zz})]\mathbf{l} & n\epsilon_{xy}\mathbf{l} & n\epsilon_{xz}\mathbf{l} \\ n\epsilon_{xy}\mathbf{l} & [k_{yy}+m(\epsilon_{xx}+\epsilon_{zz})]\mathbf{l} & n\epsilon_{yz}\mathbf{l} \\ n\epsilon_{xz}\mathbf{l} & n\epsilon_{yz}\mathbf{l} & [k_{zz}+m(\epsilon_{xx}+\epsilon_{yy})]\mathbf{l} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

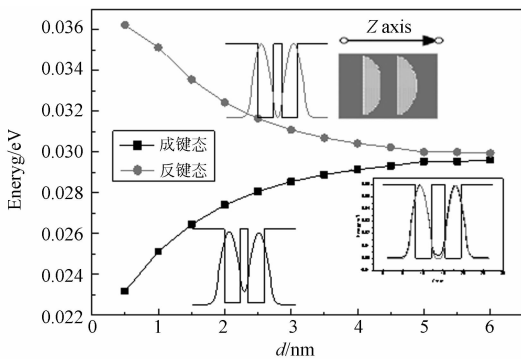
其中: $\mathbf{l}=a_v+2b$, $m=a_v-b$, $n=\sqrt{3}d$, a_v , b 和 d 是形变常数。

3 结果与讨论

图 1 是分别采用有效质量近似及 6 带 K·P

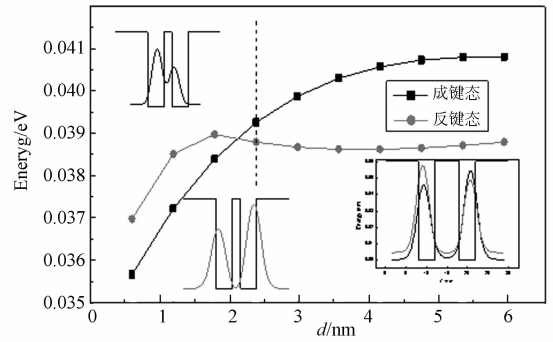
模型计算的耦合量子点内部空穴基态(H1)和第一激发态(H2)能量随耦合距离的关系。图 1(a)为采用单带有效质量近似计算耦合量子点体系中的空穴的基态和激发态能量,插图为 $d=2$ nm 及 $d=3.5$ nm 的波函数分布。计算过程中忽略了库仑和交换关联作用。从插图中的波函数分布可知,量子点的空穴基态为成键态,激发态为反成键态。当量子点间距离 d 从 0.5 增加到 6 nm 时,空穴的成键态能量随量子点间距增大而增大,而反成键态能量则逐渐减小。与图 1(a)不同的是,在图 1(b)中采用 6 带 K·P 模型计算耦合体系空穴基态与激发态能量,在计算中考虑了轻重空穴耦合及轨道自旋相互作用,空穴带 $|J, J_z\rangle$ 包括重空穴(HH),轻空穴(LH)及轨道自旋(SO)带,其中 $|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$ 对应 HH 带, $|\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ 对应 LH 带, $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ 对应 SO 带。重空穴的有效质量大于轻空穴,故重空穴态的能量比轻空穴态的能量小,也就是说空穴的基态由重空穴态主导,即空穴基态及激发态中 HH(3/2)态,即 $|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$ 态的组份比例最多,其组分含量是其它分量的数十倍,其次为 LH(1/2)态,即 $|\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ 。SO 带 $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ 组分较小,在下面的讨论中忽略此子带。

当两个量子点发生耦合时,重空穴态 HH(3/2)态及轻空穴态 LH(1/2)态分别分裂成成键态及反成键态。因自旋的手性对称,HH 态 $|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$ 和 LH 态 $|\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ 具有相反的宇



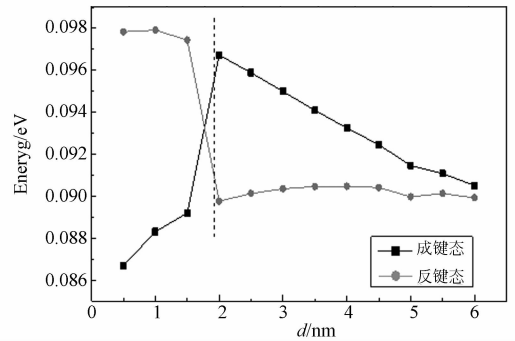
(a)采用有效质量近似

(a)Calculated as single band HH states



(b)不考虑应变时,采用 K·P 模型

(b)Results of K·P modeling without strain



(c)考虑应变时,采用 K·P 模型计算

(c)Results of K·P modeling with strain

图 1 价带能量随量子点间距的变化

Fig. 1 Splitting of hole states into bonding and anti-bonding states as a function of the interdot distance

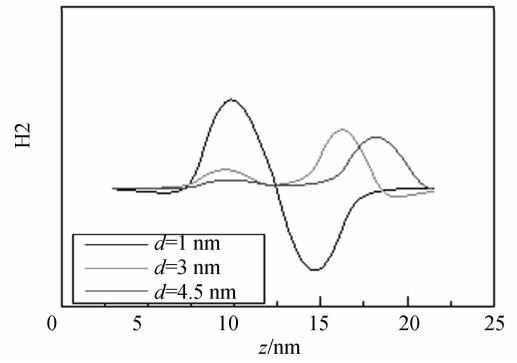
称,即成键态的 HH(3/2)与反键态的 LH(1/2)相互耦合,同时使得 HH(3/2)态的能量升高,而反键态的 HH(3/2)与成键态的 LH(1/2)耦合并使得 LH(1/2)态能量降低。当量子点距离慢慢增大时,虽然耦合波函数中 LH 的比重较小,但当量子点间距逐渐增大时,LH 隧穿的衰减远慢于 HH 隧穿的衰减,故 LH 的隧穿远强于 HH 的隧穿,LH 的作用显著增强。此时重空穴态 HH 态为反成键态,波函数大部分局域在量子点中;而轻空穴态 LH 态为成键态,此时波函数更多局域在量子点的中间势垒中。故重空穴 HH(3/2)反成键态与轻空穴 LH(1/2)成键态的耦合效应大于重空穴成键态 HH(3/2)与轻空穴反成键态 LH(1/2)的耦合,即,考虑重空穴与轻空穴耦合时,重空穴 HH 反成键态会降得更低,使得量子点体系空穴基态成为反键态,如图 1(b)所示,当量子点间距由 0.5 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 $d = d_c = 2.5 \text{ nm}$ 时,两个能级形成交叉态势;同时,由插图中的波函数得知,此时波函数发生反转,空穴基态变成了反键态,而激发态变成了成键态。

因量子点材料的晶格失配,应变对量子点结构产生了重要影响,故图 1(c)考虑了 InAs、GaAs 材料的晶格失配在结构中产生的应变,采用六带 K·P 模型计算了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。与图 1(b)类似,空穴的成键态和反成键态能级随着距离 d 的增加有反交叉现象;但是相对于图 1(b),引入应变使得量子点能级反转的临界距离由 $d_c = 2.5 \text{ nm}$ 缩小为 $d_c = 2.0 \text{ nm}$,即应变使得空穴的基态成键态反转到反成键态的临界距离缩小。

图 2 所示为考虑应变效应时量子点基态及激发态在 Z 轴的波函数实部。由图 2 可知,当量子点间距 $d = 1 \text{ nm}$ 时,量子点基态(激发态)波函数为成键(反成键)态,当量子点间距依次增加,分别为 $d = 3, 4.5$ 和 6 nm ,量子点基态波函数发生了翻转,基态(激发态)波函数改变为反成键(成键)态。同时,因量子点内的应变效应,随着量子点间距的增大,量子点价带的空穴基态波函数大部分局域在底部量子点中,而激发态则在顶部量子点中。

为了进一步了解应变对量子点空穴能态的影响,图 3 计算了量子点间距分别为 $1.0, 4.5$ 和 6 nm 时体系中流体静压应变和单轴应变 $e_{hh} = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$,这两种应变 $e_b = \epsilon_{zz} - (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})/2$ 影响了量子点内轻、重穴能级位置及其分裂。由图

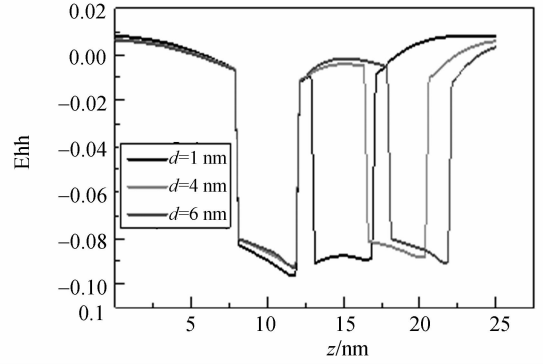


(b)第一激发态波函数

(b)The first excited hole state LH with strain

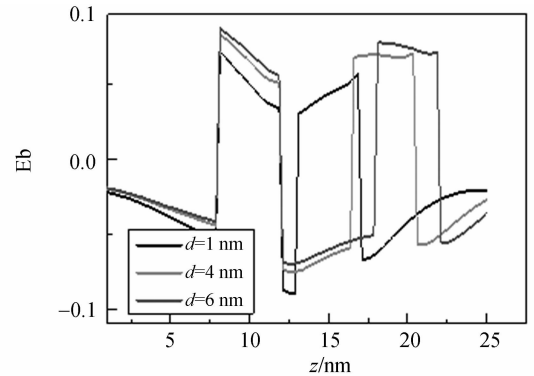
图 2 考虑应变时量子点基态及激发态在 Z 轴的波函数实部分量

Fig. 2 Spatial hole wave functions along (001)



(a)流体静压应变

(a) hydrostatic strain

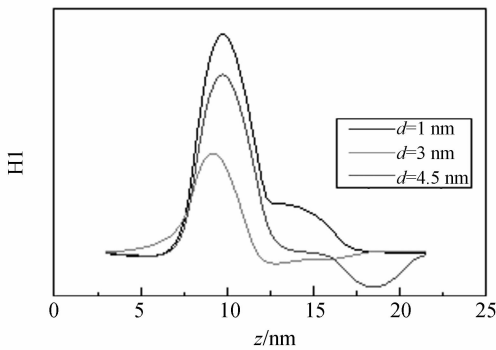


(b)双轴应变

(b)biaxial strain

图 3 量子点间距 $d = 1.0, 4.5$ 和 6 nm 时,量子点体系中(001)方向应变

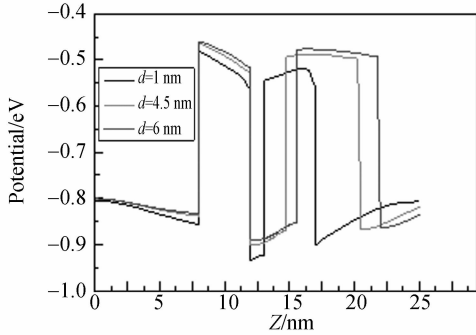
Fig. 3 Strain vs cation position along (001), i. e., along z axis at $d = 1.0, 4.5$ and 6 nm



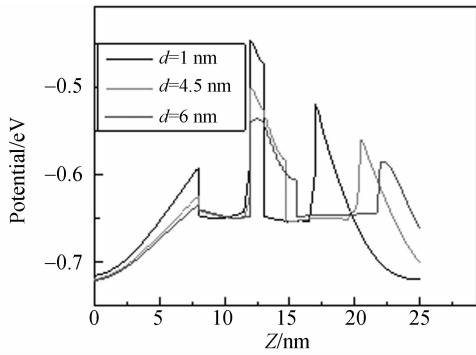
(a)基态波函数

(a) Ground hole state HH with strain

3 可知,流体静压应变基本受限在量子点内,受体系结构影响较弱;而单轴应变则较为复杂。由图 3(b)可见,随着量子点间距的增加,单轴应变相应增加。同时,对于几何结构完全相同的两个量子点,因其量子点间 GaAs 材料在结构上不具有倒置对称性,故顶部和底部量子点内部的单轴应变不同,顶部的 InAs 量子点的应变要小于底部的量子点,进而影响顶部和底部量子点的价带势能分布。



(a)重空穴 HH 带
(a)Band of HH



(b)轻空穴 LH 带
(b)Band of LH

图 4 考虑应变时,量子点间距为 1.0,4.5 和 6 nm 时 HH 及 LH 能带

Fig. 4 Strain induced confining potentials vs cation positon at $d=1.0, 4.5$ and 6 nm

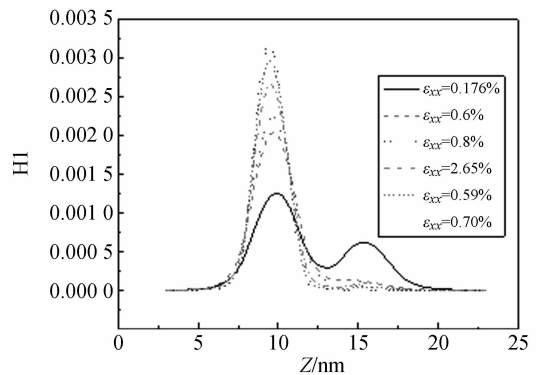
图 4 给出在考虑应变效应时,量子点间距分别为 1.0,4.5 和 6 nm 时的价带重空穴 HH,轻空穴 LH 的束缚势能。价带势能受单轴应变的影响,不同间距下量子点内空穴能带的分布比较复杂。由图 4 可知,单轴应变在 InAs 和 GaAs 材料中正负性不同,导致了 HH 和 LH 带的分裂,即单轴应变效应提高了 InAs 材料中的 HH 势阱的

束缚势能高度,同时降低了 LH 势阱的高度;另一方面,单轴应变增加了 GaAs 材料中的 HH 势垒高度,降低了 LH 势垒高度,使得 GaAs 材料中的 LH 势垒甚至低于 InAs 材料的带边,导致了在 GaAs 材料中形成了低于 InAs 带阶的 LH 势阱。量子点之间的距离越小,这种现象越明显。应变导致了耦合体系 LH 带和 HH 带的分裂,使得体系的空穴态更类似于 HH 态。

另一方面,在应变作用下,GaAs 中的 LH 势垒低于 InAs,使得轻空穴更多机率局域在量子点之间的 GaAs 材料中,即轻空穴在量子点中的比重下降,在量子点间的 GaAs 势垒中的比重上升。相比于不考虑应变的情况,重空穴态的反成键态和轻空穴之间的成键态的耦合增强,反成键态的重空穴态能量降得更低,更容易成为基态,即应变效应使得空穴基态从成键态翻转为反成键态的临界距离减小。

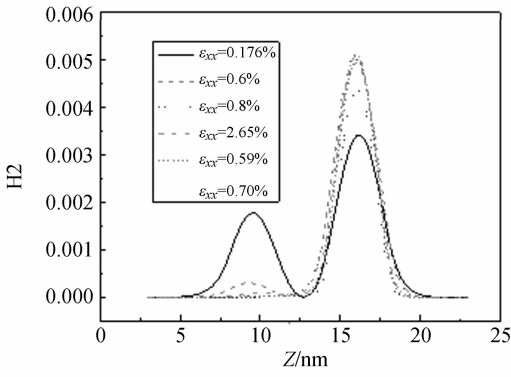
同时,因体系顶部的应变弛豫形成双量子点体内应变的不对称,即底部量子点的应变大于底部量子点的应变,导致了底部量子点 HH 势阱具有较大的束缚势能,相应的能级也应深于顶部量子点。由图 2 可看出,量子点价带的空穴基态基本局域在底部的量子点中,而激发态则局域在顶部量子点中。另一方面,量子点间距离越小,应变越小,价带势阱的束缚势能则越小。

为了进一步考虑应变对量子点空穴态特性的影响,通过改变量子点 InAs 材料的晶格常数调节体系中的应变,进而调节空穴在点内的分布特性。因 e_{hh} 及 e_b 都是 $\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}$ 的函数,同时 $e_{zz} = (-\frac{2c_{12}}{c_{11}})\epsilon_{xx}$,图 5 所示为 $d=2$ nm,耦合体系中的



(a)基态波函数

(a)Ground state wave function



(b) 激发态波函数

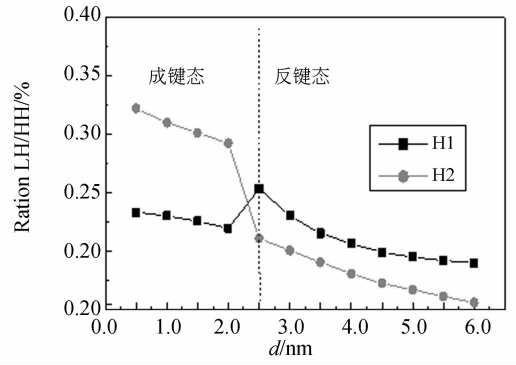
(b) Excited state hole wave function

图 5 $d=2$ nm 时耦合体系中的空穴波函数随应变的变化趋势

Fig. 5 Spatial distributions of ground state and excited state hole wave functions in (001) direction as function of strain at $d=2$ nm

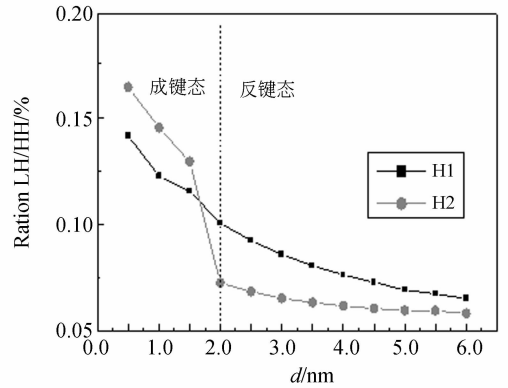
空穴态随应变 ϵ_{xx} 的变化趋势。应变的改变导致了价带带阶的变化,当应变慢慢增大时,轻重空穴的势垒发生变化,即 InAs 材料中的 HH 势阱的束缚势能高度,同时降低了 LH 势阱的高度。LH 和 HH 之间的分裂也慢慢增大。同时导致重空穴态的反成键态和轻空穴之间的成键态也随之耦合增强,由图可知,当 $d=2$ nm 时,量子点应变 ϵ_{xx} 由 0.176% 逐渐增大至 7.0%,量子点空穴基态特性发生了翻转。当时,反成键态的重空穴态能量低于成键态,即基态波函数从成键态转变为反键态。另一方面,随着应变 ϵ_{xx} 逐渐增大,空穴基态在量子点内的分布也发生了变化,波函数向底部量子点内分布,即空穴在顶部量子点的分量随着应变的增大而逐渐减少,大部分空穴均局域在底部的量子点中。而激发态波函数分布趋势则相反。随着量子点内应变增大,使得空穴分布大部分局域在底部量子点中。同时,波函数也从反对称态慢慢翻转为对称态。

为了进一步了解多带模型下应变效应对量子点分子态形成的情况,图 6 所示为耦合量子点体系中空穴基态(激发态)的 HH、LH 波函数比例。如图所示,当 $d < d_c = 2$ nm 时,空穴基态中重空穴比例高于轻空穴比例,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,激发态表现为反键态。当 $d > d_c$ 以后,相对于激发态,基态具有较大的



(a) 不考虑应变

(a) Without strain



(b) 考虑应变

(b) With strain

图 6 轻重空穴(HH、LH)波函数比例随量子点间距的。虚线为能级反交叉距离

Fig. 6 Contribution of HH, LH states as a function of interdot distance

LH/HH 比例,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,基态和激发态发生反交叉行为,空穴基态变成反键态。据根据 Climente 等的报道^[4],此时 LH 主要来自于 $J_z = +1/2$ 的反成键 LH 部分。

同时,应变改变了体系中 HH 和 LH 的比例,以 $d=1.0$ nm 为例,在相同的耦合距离下,相对于未考虑应变效应时,LH/HH 波函数比例从 23% 左右下降到 15% 左右,即应变使得轻重空穴的混合减少,空穴基态中重空穴比重明显上升。

4 结 论

本文采用 6 带 K·P 理论计算了应变效应下耦合量子点系统的空穴基态及激发态的能态特

性,计算结果表明,耦合量子点体系中,空穴基态成键态和反成键态能量随着量子点间距的增大发生翻转,基态从成键态翻转为反成键态。同时,应

变效应使得量子点的重空穴及轻空穴的能带发生改变,轻重空穴耦合减弱,基态和激发态之间发生成键、反成键态翻转的临界距离减小。

参考文献:

- [1] BENJAMIN LINANAU, KATHY LUDGE, WENG W, *et al.*. Failure of the α factor in describing dynamical instabilities and chaos in quantum-dot lasers [J]. *Phys. Rev. E*, 2012, 86:652-657.
- [2] KAVOUSANAKI E, BURKARD G. Signatures of spin blockade in the optical response of a charged quantum dot [J]. *Phys. Rev. B*, 2012, 86:4512-4519.
- [3] BURKARD G. Quantum information: Blockade at a different level [J]. *Nature Nanotechnology*, 2010, 7:617-619.
- [4] KUMBHA K P. Observation of nonlinear optical effects in some semiconductor quantum dot materials using Nd YAG laser radiation [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2011, 19(2):228-236.
- [5] CLIMENTE J I, KORKUSINSKI M, GOLDONI G. Influence of valence-band spin-orbit coupling on the entanglement of excitons in coupled quantum dots [J]. *Phys. Rev. B*, 2008, 78:115323-1-12.
- [6] HSIEH C Y, CHERITON R, KORKUSINSKI M. Valence holes as Luttinger spinor based qubits in quantum dots [J]. *Phys. Rev. B*, 2009, 80:235320-1-7.
- [7] CLIMENTE J I, KORKUSINSKI M, GOLDONI G. Theory of valence-band holes as Luttinger spinors in vertically coupled quantum dots [J]. *Physica E (Amsterdam)*, 2008, 40:1862-1864.
- [8] CHWIEJ T, SZAFRAN B. Szafran, Signatures of antibonding hole ground states in exciton spectra of vertically coupled quantum dots in an electric field [J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 81:0753021-8.
- [9] JASKOLSKI W, ZIELINSKI M, GARNETT W, *et al.*. Strain effects on the electronic structure of strongly coupled self-assembled InAs / GaAs quantum dots: Tight-binding approach [J]. *Phys. Rev. B*, 2006, 74:195339-1-9.
- [10] VURGAFTMAN I, MEYER J R, RAM-MOHAN L R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys [J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89: 5815-5872.
- [11] LUCJAN J, PAWEL H, ARKADIUSZ W. *Quantum Dots* [M]. Berlin: Springer-Verlag Berlin Herderlberg Press, 1998.

作者简介:



汤乃云(1976—),女,江苏盐城人,博士,副教授,2002年于苏州大学获得硕士学位,2005年于中国科学院上海技术物理研究所获得博士学位,主要从事低维纳米结构的光电性质的研究。E-mail: naiyun@mail. sitp. ac. cn