

嵌入量子点的介观 Aharonov-Bohm 环的基态 与持续电流^{*}

叶剑斐 叶 飞 丁国辉

(上海交通大学物理系, 上海 200030)

(2002 年 4 月 10 日收到, 2002 年 6 月 12 日收到修改稿)

对嵌入量子点的介观金属环进行了研究, 在二级微扰变分近似下得出了其基态能量表达式和基态持续电流表达式, 并在库仑排斥势趋于无穷大的假设下, 得到了系统 Kondo 温度及持续电流的数值计算结果, 并且将它们与一级微扰变分近似所得结果进行了对比, 指出了它们之间存在的差异, 对于这一系统二级微扰变分近似将给出更好的数值计算结果.

关键词: Kondo 效应, 持续电流, 变分法

PACC: 7335, 7335C

在介观系统中由于电子波函数相位相干性的存在产生了许多有趣的现象. 例如 Buttiker 等人^[1]在 20 世纪 80 年代初预言了在一维介观金属环中可能存在着由磁场诱导的持续电流, 并且此持续电流的大小将随通过环的磁通量的变化而作周期性振荡. 在随后的几年里人们先后对 10^7 个铜环^[2], 单个金环^[3]及 GaAs-AlGaAs 环^[4]进行了实验, 并观测到了这一现象. 根据已有的实验结果人们发现, 当金属环中的电子输运属于弹道区时对环中持续电流的测量结果与理论预测基本符合, 然而当金属环中的电子输运属于扩散区时实验与理论之间存在着很大分歧^[5, 6].

近年来人们对介观金属环中嵌入量子点的系统也产生了浓厚的兴趣^[7-12]. 这是因为在对单个量子点输运问题的研究中观测到了 Kondo 效应及 AB 振荡现象^[7], 这表明电子通过量子点系统时仍可保持相干性. 当量子点上的电子数目为奇数时^[8], 它可以近似地看作一个带有自旋的磁性杂质. 在低温下由于 Kondo 效应金属中的电子将对杂质自旋产生屏蔽作用, 因此在该杂质周围将吸引部分金属中的电子, 构成一个屏蔽电子云. 这是一个让物理学家感兴趣的现象, 但如何在实验上观察到这一现象一直是一个未能解决的问题. 而介观金属环中嵌入量子点的

模型为观察 Kondo 屏蔽电子云提供了可能性^[9-11]. 在这一系统中金属中的电子被限制在一维环中运动, 只需通过改变施加在量子点上的电压 (gate voltage) 便可控制量子点上的电子数及量子点与金属环之间的耦合参量, 从而可以更深入地探讨 Kondo 效应及其对持续电流的影响.

本文对嵌入量子点的介观金属环进行了研究, 在二级微扰变分近似下^[13]得出了其基态能量表达式和基态持续电流表达式, 并在库仑排斥势趋于无穷大的假设下, 得到了系统 Kondo 温度及持续电流的数值计算结果.

一维自由环 (介观 Aharonov-Bohm 环) 中嵌入量子点的系统 (图 1) 在紧束缚表象中可表示为

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_D + H_T \\ &= -t \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{N-2} (c_{j\sigma}^+ c_{j+1\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^+ d_{\sigma} \\ &\quad + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} - t_L \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^+ c_{1\sigma} + \text{h.c.}) \\ &\quad - t_R \sum_{\sigma} (e^{i\phi} c_{N-1\sigma}^+ d_{\sigma} + \text{h.c.}), \end{aligned} \quad (1)$$

H_0 , H_D 分别是自由环和量子点的哈密顿量, t 是近邻格点间的跳跃矩阵元, N 为格点数, $c_{j\sigma}^+$, $c_{j\sigma}$ 分别为第 j 个自由格点上的产生算符和湮没算符, ϵ_d 代表了量子点中的能级大小, d_{σ}^+ , d_{σ} 则是量子点上的产

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 19975031) 和博士点基金 (批准号: 1999024833) 资助的课题.

生算符和湮没算符, $n_{d\uparrow}, n_{d\downarrow}$ 分别是量子点中自旋向上和自旋向下的粒子数算符, U 代表了两粒子间库仑排斥势的大小, H_T 是自由环与量子点间的相互作用项, t_L, t_R 分别表示了电子从左边或从右边跃入或跃出量子点的跳跃矩阵元, $\phi = 2\pi\Phi/\Phi_0$ ($\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$, 即最小磁通量, Φ 为外部磁通量的大小).

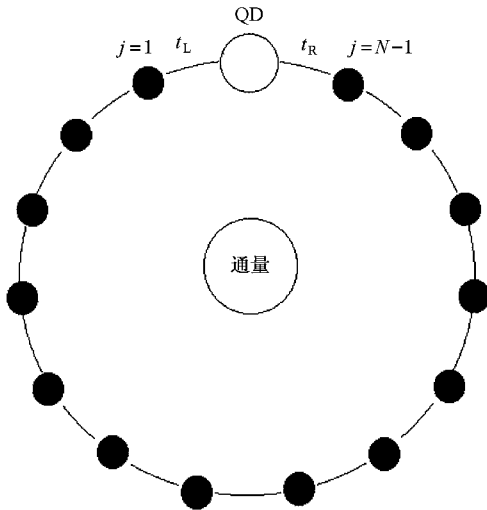


图1 嵌入量子点的介观 Aharonov-Bohm 环示意图

对哈密顿量(1)作如下线性变换:

$$c_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{m=1}^{N-1} c_m \sin\left(\frac{m\pi j}{N}\right) \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

则(1)式变为

$$H = \sum_{\sigma} \sum_{m=1}^{N-1} \epsilon_m c_{m\sigma}^+ c_{m\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^+ d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\sigma} \sum_{m=1}^{N-1} (t_m c_{m\sigma}^+ d_{\sigma} + t_m^* d_{\sigma}^+ c_{m\sigma}), \quad (2)$$

式中

$$\epsilon_m = -2t \cos \frac{m\pi}{N},$$

$$t_m = -\sqrt{\frac{2}{N}} \left(\sin \frac{m\pi}{N} [t_L + (-1)^{m+1} e^{i\phi} t_R] \right).$$

此时 H_0 已对角化了.

考虑库仑排斥势 U 为无穷大的情况, 用变分法求(2)式的基态能量. 构造变分基态

$$|\Psi(N_e)\rangle = A(|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle),$$

$$|0\rangle = \prod_{\sigma} \prod_{m=1}^{N_{\sigma}} c_{m\sigma}^+ |\text{vacuum}\rangle,$$

$$|1\rangle = \sum_{\sigma} \sum_{m=1}^{N_{\sigma}} a_{m\sigma} d_{\sigma}^+ c_{m\sigma} |0\rangle,$$

$$|2\rangle = \sum_{\sigma} \sum_{m \leq N_{\sigma} < l} b_{lm\sigma} c_{l\sigma}^+ c_{m\sigma} |0\rangle,$$

这里 N_{σ} 代表带有自旋 σ 的电子数, $N_e = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ 是整个系统的电子数. 以上各式中的 $a_{m\sigma}, b_{lm\sigma}$ 均为变分参量, 它们的大小将在变分取极值的过程中确定. A 为态归一化因子.

定义函数

$$F = \langle \Psi(N_e) | H | \Psi(N_e) \rangle - E_0 \langle \Psi(N_e) | \Psi(N_e) \rangle, \quad (3)$$

E_0 为 Lagrange 因子, 对应于系统的基态能量. 由变分条件 $\frac{\delta F}{\delta a_{m\sigma}^*} = 0, \frac{\delta F}{\delta b_{lm\sigma}^*} = 0$ 得

$$a_{m\sigma} = \frac{1}{\Delta E + \epsilon_m - \epsilon_d} \{ t_m^* + \sum_{l > N_{\sigma}} b_{lm\sigma} t_l^* \}, \quad (4)$$

$$b_{lm\sigma} = \frac{t_l a_{m\sigma}}{\Delta E + \epsilon_m - \epsilon_l}. \quad (5)$$

将(4)(5)式代入(3)式中, 可得到系统的基态能量表达式

$$\Delta E = \sum_{\sigma} \sum_{m=1}^{N_{\sigma}} a_{m\sigma} t_m, \quad (6)$$

$\Delta E = E_0 - E_{\Omega}$, E_{Ω} 为相同条件下自由环的基态能量. 由(4)(5)式可得

$$a_{m\sigma} = \frac{t_m^*}{\Delta E + \epsilon_m - \epsilon_d - \sum_{l > N_{\sigma}} \frac{|t_l|^2}{\Delta E + \epsilon_m - \epsilon_l}}. \quad (7)$$

同时也得到了 $b_{lm\sigma}$ 的表达式. 最终得到系统基态能量自洽方程

$$\Delta E = \sum_{\sigma} \sum_{m=1}^{N_{\sigma}} \frac{|t_m|^2}{\Delta E + \epsilon_m - \epsilon_d - \sum_{l > N_{\sigma}} \frac{|t_l|^2}{\Delta E + \epsilon_m - \epsilon_l}}. \quad (8)$$

对比文献[10], 在那里作者所求得的基态能量为

$$\Delta E = \sum_{\sigma} \sum_{m=1}^{N_{\sigma}} \frac{|t_m|^2}{\Delta E + \epsilon_m - \epsilon_d} \quad (9)$$

(此式也是在库仑排斥势 U 为无穷大的条件下得到的). 两者之间有着明显的差别, 这差别来自于变分基态的不同假设. 为叙述方便我们称(9)式为一级微扰近似所得结果, 称(8)式为二级微扰近似所得结果.

定义 $T_K = \epsilon_d - \epsilon_f - \Delta E$, ϵ_f 为被电子占据的最高能级, 当取热力学极限时 ϵ_f 就是费米能级. T_K 是与 Kondo 温度相对应的物理量(本文仍称它为 Kondo 温度), 当费米面附近的能级间隔趋于零时 T_K 就是 Kondo 温度 T_K^0 . 它反映了系统基态能量由于 Kondo

效应而下降的大小, T_K 越大则系统基态能量越小.

在图 2 中同时列出了用两种不同微扰近似得到的 T_K 值随费米面附近平均能级间隔 $\propto \delta = \frac{2\pi t}{N}$ 的变化曲线. 此时, $|t_m|^2$ 项中的 ϕ 已取成了 $\frac{\pi}{2}$, 这样

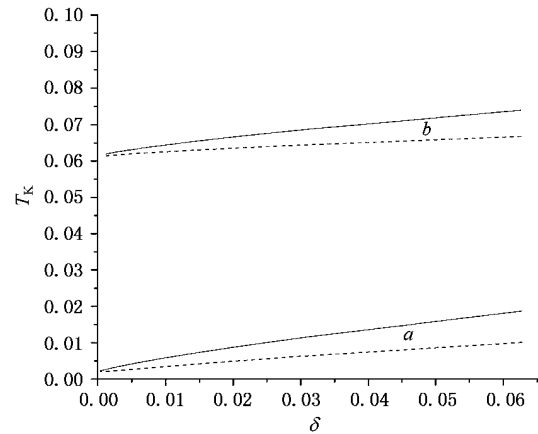


图 2 系统 Kondo 温度随费米面附近平均能级间隔 $\propto \delta = \frac{2\pi t}{N}$ 的变化曲线 (实线对应于总电子数是偶数时的情形, 虚线对应于总电子数为奇数时的情形. (a) 一级变分微扰结果 (b) 二级变分微扰结果)

做能使交叉项 $t_L t_R \cos \phi$ 等于零. 图中的实线对应于总电子数是偶数时的情形, 虚线对应于总电子数为奇数时的情形. 从图中可以发现两组图线的变化趋势是大体相同的, 而且在总电子数为偶数的条件下得到的 T_K 值要大于总电子数为奇数时相对应的 T_K 值. 但用二级微扰近似得到的 $T_K^{(2)}$ 值要比用一级微

扰近似得到的 $T_K^{(1)}$ 值大得多. 这表明由二级微扰近似得到的基态能量 $E_0^{(2)}$ 要小于由一级微扰方法得到的基态能量 $E_0^{(1)}$. 因此在构造变分基态时考虑二级微扰将对系统 Kondo 温度的大小有较大修正, 所得到的基态也更接近于系统真正的物理基态.

由于 E_Ω 的大小与 ϕ 无关, 所以在零温时存在于系统中的持续电流大小可以由

$$I = - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial \Delta E}{\partial \phi} \tag{10}$$

求得. 图 3 图 4 分别给出了二级微扰近似及一级微扰近似得到的持续电流 I 与磁通量之间的关系. 图中纵坐标为持续电流 I 与相同条件下自由环中持续电流 I_0 的比值. 图 3(a) 图 4(a) 对应于总电子数为偶数时的情形, 图 3(b) 图 4(b) 对应于总电子数为奇数时的情形. 我们可以发现无论用哪种微扰近似得到的持续电流随通过环的磁通量的变化关系都是以 2π 为周期的连续光滑曲线, 它们有着与正弦曲线相同的对称性. 但在相同的条件下由二级微扰近似得到的持续电流的最大值要大于用一级微扰近似得到的持续电流的最大值. 例如, 当 $N = 10000, N_e = 10000$ 时, 用二级微扰近似得到的电流比值的最大值大约在 3 左右, 而用一级微扰近似得到的电流比值的最大值仅略大于 1.5, 两者相差约一倍. 与文献 [10] 所得结果有很大不同, 文献 [10] 认为当电子总数为奇数时由于量子点的存在系统中的持续电流将小于相同条件下自由环中的持续电流, 即两者比值将始终小于 1. 但在图 4(b) 中却可以看到当 $N = 1000, N_e = 999$ 时, 两者比值的最大值在 1.4 左右.

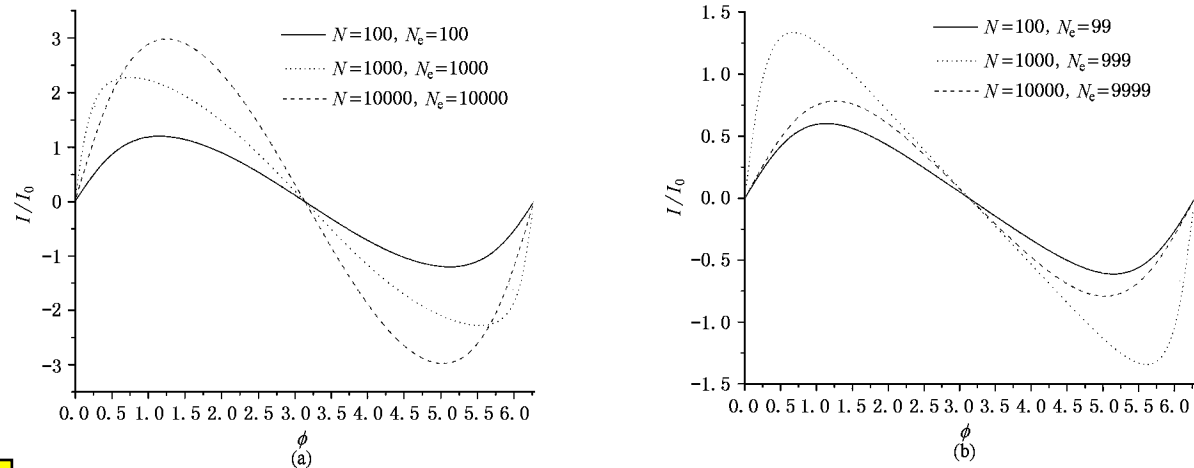


图 3 用二级微扰变分近似求得的持续电流随穿过环的外磁通变化曲线 (a) 总电子数为偶数 (b) 总电子数为奇数 (参量 $t_L = t_R = 0.3, \epsilon_d = -0.75$)

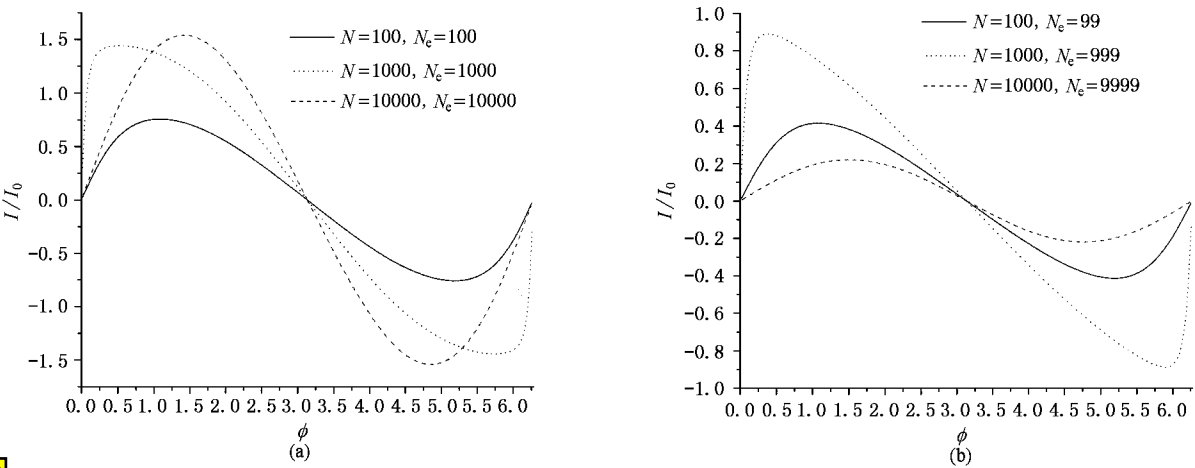


图 4 用一级微扰变分近似求得的持续电流随穿过环的外磁通变化曲线 (a)总电子数为偶数 (b)总电子数为奇数(参量 $t_L = t_R = 0.3$, $\epsilon_d = -0.75$)

综上所述,我们用二级微扰变分方法讨论了嵌有量子点的一维介观环系统,得到了该系统的基态能量和基态持续电流的表达式.并在库仑排斥势趋于无穷大的假设下得到了系统 Kondo 温度及持续电流的数值计算结果.并且将这些结果与一级微扰变

分方法所得结果进行了对比,两种近似所得结果之间存在着很多差异,尤其是当总电子数为奇数时由二级微扰变分近似所得到的持续电流值与由一级微扰变分近似所得的持续电流值之间存在着质上的差别.

[1] Buttiker M ,Imry Y and landauer R 1983 *Phys. Lett. A* **96** 365

[2] Levy L P ,Dolan G ,Dunsmuir J and Bouchiat H 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 2074

[3] Chandrasekhar V *et al* 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3578

[4] Mailly D ,Chapelier C and Benoit A 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2020

[5] Cheung H F ,Riedel E K and Gefen Y 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 587

[5] Cheung H F ,Riedel E K and Gefen Y 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3192

[6] Ambegaoker V and Eckern U 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 381

[7] Schuster R *et al* 1997 *Nature(London)* **385** 417

[8] Cronenwett S M *et al* 1987 *Sinence* **281** 540

[9] Affleck I and Simon P 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2854

[10] Kicheon Kang and Sung-Chul Shin 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 5619

[11] Hu H ,Zhang G M and Yu I 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5558

[12] Wang J S ,Feng J and Zhan M S 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 299(in Chinese) 王继锁、冯 健、詹明生 2001 物理学报 **50** 299]

[13] Gunnarsson O and Schönhammer K 1983 *Phys. Rev. B* **28** 4315

The ground state and persistent current of mesoscopic Aharonov-Bohm ring embedded with a quantum dot^{*}

Ye Jian-Fei Ye Fei Ding Guo-Hui

(*Department of Physics ,Shanghai Jiaotong University ,Shanghai 200030 ,China*)

(Received 10 April 2002 ; revised manuscript received 12 June 2002)

Abstract

An interacting quantum dot inserted in an Aharonov-Bohm ring is investigated. The explicit expression of the ground-state energy and the persistent current of the system are obtained by a second-order variational perturbation approximation method. The numerical results of the Kondo temperature and the ground-state persistent current of the system are also given under the condition that the Coulomb repulsion is infinite.

Keywords : Kondo effect , persistent current , variational method

PACC : 7335 , 7335C

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19975031) , and the Doctorate Foundation of State Education Ministry of China (Grant No. 1999024833).