

磁场下量子点的电子态

郭江民 阮文英 刘有延

(华南理工大学物理系, 广州 510641)

(1995 年 3 月 2 日收到)

原子和核结构的少体理论方法改进后用以研究磁场下包含三个电子的二维量子点的电子性质. 我们首先解析地证明了对应于三电子系统基态的幻数角动量的存在起源于量子力学对称性的要求. 基于少体理论方法的计算确认了上述理论分析的正确性, 计算同时显示出磁场强度和约束势对三电子系统基态的影响.

PACC: 7190; 6848

1 引 言

现代微加工技术的发展使我们可以把电子约束在一个二维圆形小区域内, 人们通常把它称为二维量子点. 最常见的例子是在夹于二层绝缘的 AlGaAs 之间的 GaAs 层上通过加上门压金属电极来形成这样的量子点^[1]. 通过控制门压, 量子点内的电子数可以从 1 开始, 逐个增加到 100 左右, 而形成少电子系统. 当然, 这少电子系统遵从量子力学规律, 有极强的量子效应, 电荷和能量都是量子化的^[2]. 实验和理论分析表明, 当电子数目很少时, 我们用简谐势来描述少电子系统所受到的约束是一个很准确的近似^[3,4]. 目前实验上我们还未测量一个单个的量子点的能级和确定它的相应电子态^[5], 但理论上已有一些文章研究当电子数为 3, 4 或 5 个时, 有或没有磁场下的基态和能级分布以及电子-电子相互作用和磁场对基态及能级的影响^[5,6]. 其实这个问题已有多年的研究历史. 早在 1983 年 Laughlin 在研究分数量子霍尔效应时就曾研究在强磁场下受简谐势约束的三个电子二维系统的量子态问题. 他研究了最低 Landau 能级的自旋极化态, 指出具有幻数角动量 $L = 3k$, $k = 1, 2, 3, \dots$ 的态是基态^[7]. Girvin 等人分析了包含更多个电子的系统, 证明了对于包含 3, 4, 5 个电子的少电子系统, 幻数角动量虽然各有不同, 但它们确实是存在的. 研究工作者还利用熟知的公式 $\nu = n_e(n_e - 1)/2L$, 对应出 $L = 3k$ 系列的分数填充因子 (Fractional Filling Factor), 得出相应的 ν 的系列为 1, 1/2, 1/3, 1/4, ... 相应的基态便称为分数量子霍尔效应态. 但我们应注意量子霍尔效应的物理本质与本文所讨论的少电子系统是不同的, 因此可出现偶数分母的填充因子. 现在存在的问题是: 到目前为止, 所有已发表的计算都以不同的形式在不同程度上进行了近似, 同时他们所计算的参数取值范围也较小. 另一方面, $L = 3k$ 幻数角动量只是极化态的情形, 非极化态的基态是什么以及当同时比较极化态和非极化态时的基态角动量是什么, 他们没有给出明确的结论. 我们改进了已被广泛地使用于原子和核结构理论研究中的少体方法来研究简谐势束缚下的少电子系统, 在本文首先通过量子力学对称性分析, 证明为什么会出现幻数角动量以及它们的取

值,其次运用少体理论方法精确地计算出在磁场下三电子系统的能级分布与角动量以及磁场强度之间的关系,得出系列新的结果.

2 少体理论方法

对于受简谐势约束在一个二维圆形小区域中包含三个电子的量子点,在外磁场存在下并包含电子间库仑作用的哈密顿量可写为

$$H = \frac{1}{2m^*} \sum_{i=1}^3 [\hat{P}_i + e\mathbf{A}_i]^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 \sum_{i=1}^3 r_i^2 + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - g^* \mu_B B \sum_i \hat{S}_{iz}, \quad (1)$$

其中 m^* 为电子有效质量, $\mathbf{A}_i$ 为矢量势, ω_0 为约束简谐势圆频率, g^* 为朗德因子, μ_B 为玻尔磁子, $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ 为电子间库仑相互作用. 电子自旋产生的塞曼能量为

$$E_S = g^* \mu_B B \sum_i \hat{S}_{iz} = g^* \frac{m^*}{m_e} \frac{\hbar \omega_c}{2} \sum_i \hat{S}_{iz}. \quad (2)$$

在对称规范下, $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$. 这时的哈密顿量可改写为

$$H = \frac{1}{2m^*} \sum_{i=1}^3 \hat{P}_i^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2(B) \sum_{i=1}^3 r_i^2 + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \frac{1}{2} \omega_c \sum_i \hat{L}_{iz} - g^* \mu_B B \sum_{i=1}^3 \hat{S}_{iz}. \quad (3)$$

在上式中, $\omega_0^2(B) = \omega_0^2 + \omega_c^2/4$, 而 $\omega_c = eB/m^*$ 是回旋频率(国际单位制). 从这里可以看出磁场的影响之一是增强了简谐约束势.

量子力学中的少体理论方法已成功地用于研究原子和核结构^[9,10]. 它选用一组 Jacobi 坐标 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N-1}$ 来描述所研究的 N 粒子系统. 它的主要优点是可以把质心运动和相对运动分离, 从而得出精确的数值解^[9,10]. 对我们所研究的三个电子系统可选取 Jacobi 坐标 $\xi_1 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\xi_2 = \mathbf{r}_3 - (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$, 质心坐标为 $\mathbf{R}_{cm} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3)/3$, 而相应的约化质量为 $\mu_{\xi_1} = m^*/2$, $\mu_{\xi_2} = 2m^*/3$, 总质量 $\mu = 3m^*$. 在使用如上 Jacobi 坐标后, 三电子系统的哈密顿量可写为

$$H = H_{\text{质心}} + H_{\text{相对}} - g^* \mu_B B \sum_i \hat{S}_{iz} + \frac{1}{2} \omega_c \sum_{i=1}^3 \hat{L}_{iz}, \quad (4)$$

$$\text{其中 } H_{\text{质心}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} + \frac{M}{2} \omega_0^2(B) R^2, \quad (5)$$

$$H_{\text{相对}} = \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_i} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \frac{1}{2} \mu_i \xi_i^2 \omega_0^2(B) \right] + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (6)$$

由上可见质心进行的是具有质量为 M , 角频率为 $\omega_0(B)$ 的二维谐振子运动, 它的结果可在量子力学书中见到^[11]. 而少电子系统的相对运动则通过数值解得到^[9,10].

3 三电子系统的基态角动量

本节通过量子力学对称性所提出的要求, 得出三电子系统基态所对应的角动量, 在随

后的数值计算将证明本节结论的正确性.

我们先在不加磁场的情况下进行讨论. 由于质心运动是平庸的, 我们只需看内部运动部分:

经过若干变换, 这时(6)式的 $H_{\text{相对}}$ 可写为

$$H_{\text{相对}} = \sum_{i=1}^2 \frac{\hbar^2}{2\mu_i} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \sum_{i>j} U(r_{ij}),$$

$$\text{其中等效相互作用势 } U(r_{ij}) = \frac{1}{6} m^* \omega_0^2 r_{ij}^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{ij}}. \quad (7)$$

方程右边第一项是来源于少电子系统所受的约束, 方程右边第二项是库仑势. 容易看出这等效相互作用势仍近似地认为是一个简谐势. 它存在一个势能为极小值的距离 $r_{ij} = r_0$, 当两电子的距离小于 r_0 时, 彼此排斥, 而大于 r_0 时, 则吸引. 我们易于求出 $r_0 = (3e^2/4\pi\epsilon m^* \omega_0^2)^{1/3}$. 这里可以有趣地看出电子间相互作用的库仑力在电子存在约束势时并没有使电子彼此完全排斥开, 而是形成一个新的平衡结构. 我们可以推论当三个电子之间的距离均为 r_0 时, 系统的总势能 $U = \sum_{i>j} U(r_{ij})$ 为最低, 因此对应总势能最低的基态应采取三电子分别处于正三角形顶点的构型. 当然, 现在存在的并非经典力学的轨道, 三电子所组成的构型是在变动的, 但是以处于正三角形结构时的几率为最大^[13].

泡利原理即波函数反对称性的要求将带来什么进一步的结果呢? 对三电子系统存在 $s=3/2$ 的极化态和 $s=1/2$ 的非极化态, 我们先讨论极化态的情形. 这时由于自旋波函数是对称的, 因此空间波函数应是反对称的. 它在循环置换 $P_{(123)}$ 下不变, 因 $P_{(123)}$ 是偶置换:

$$\Phi_L = P_{(123)} \Phi_L. \quad (8)$$

但处于正三角形构型的三个电子, 循环置换等价于 120° 的转动. 因此我们有

$$P_{(123)} \Phi_L(\Delta) = \exp(i \frac{2}{3} \pi L) \Phi_L(\Delta). \quad (9)$$

综合(8), (9)两式, 得出

$$\left[1 - \exp(i \frac{2}{3} \pi L) \right] \Phi_L(\Delta) = 0, \quad (10)$$

有非零的波函数只能是 $L=3k$, k 为正整数. 这就是 Laughlin 等人得出的使电子态为基态的“幻数”角动量. 由上可见它存在的物理根源其实就是能量变分原理和泡利原理, 如换一个角度来说就是量子力学所要求的波函数的对称性. Laughlin 等人在讨论三电子系统时没有讨论 $s=1/2$ 非极化态, 但我们发现非极化态并非平庸的. 在非极化态中, 波函数可展开为

$$\Psi = \Phi_L^a \chi_0^{1/2} + \Phi_L^b \chi_1^{1/2}, \quad (11)$$

其中 χ_s 的含意是电子 1 和 2 的自旋耦合为 s , 随后 s 再与电子 3 的自旋耦合成 S , 这时空间波函数部分的变换为

$$P_{(123)} \Phi_L^a = -\frac{1}{2} \Phi_L^a + \frac{\sqrt{3}}{2} \Phi_L^b,$$

$$P_{(123)} \Phi_L^b = -\frac{\sqrt{3}}{2} \Phi_L^a - \frac{1}{2} \Phi_L^b. \quad (12)$$

在正三角形构型下, (9)式对 $\Phi_L^a(\Delta)$ 和 $\Phi_L^b(\Delta)$ 均同样成立. 这时有

$$\left[1 + \exp(i \frac{2}{3} \pi L) + \exp(i \frac{4}{3} \pi L) \right] \Phi_L^j(\Delta) = 0, \quad j = a, b. \quad (13)$$

与极化态恰恰相反, 当 $L \neq 3k$ 时, 上式成立, 即该角动量对应的量子态为处于正三角形结构的基态. 对构成基态来说, 极化态和非极化态有趣地竟是周期性交替! 因而 Laughlin 等人单一地把角动量 $L = 3k$ 叫做“幻数”角动量并没有全面反映真实情况.

4 磁场下三电子系统基态的数值结果

在考虑入磁场后, 我们计算的出发点是(3)式, 所采用的数据是: GaAs 的电子有效质量 $m^* = 0.067 m_e$, $\hbar = 1.05459 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, $e = 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$, $g^* = 0.44$, $m_e = 9.1095 \times 10^{-31} \text{ kg}$.

图 1 给出磁场为零时 $s = 3/2$ 极化态和 $s = 1/2$ 非极化态的基态能量和角动量的关系, 从图中可以看出极化态的基态角动量满足 $L = 3k$, k 为正整数, 而非极化态基态则是满足 $L \neq 3k$ 的所有 L 值. 这计算结果完全证实了本文第三节的理论分析, 这两态在角动量 L 上周期地交替成为基态.

图 2 中显示的是基态在不同磁场范围内相应的角动量取值, 为了看出约束势 $\frac{m^*}{2} \omega_0^2 r^2$ 大小的影响, 我们把 $\hbar \omega_0 = 1 \text{ meV}$ 和 $\hbar \omega_0 = 5 \text{ meV}$ 两种情形的相图叠合在一起. 我们可以看出在高磁场下的基态主要为极化态, 而在低磁场下 ($B < 4 \text{ T}$) 则为非极化态. 与

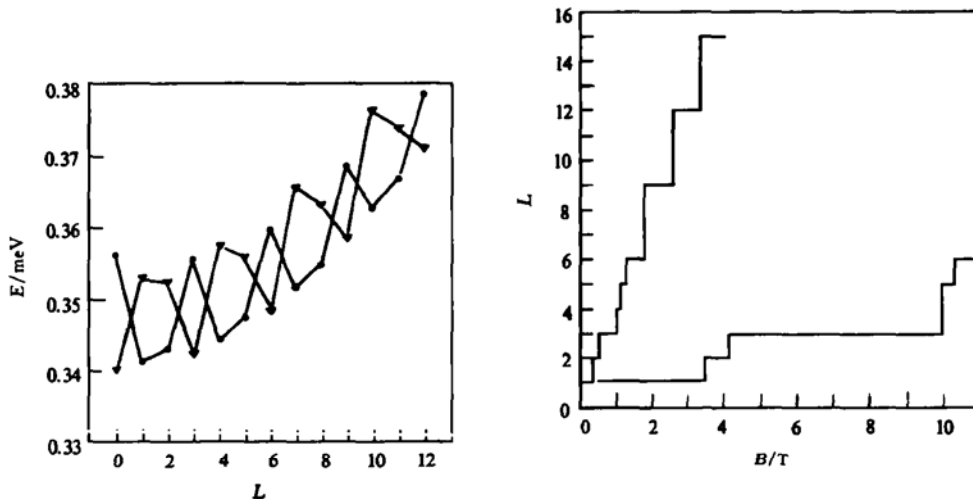


图 1 三电子系统的基态和角动量关系 图中实线表示极化态, 虚线表示非极化态. 图中可看出极化态和非极化态在角动量轴上周期地交替成为基态

图 2 基态在不同磁场范围内相应的角动量取值 其中粗线和细线分别表示 $\hbar \omega_0 = 1 \text{ meV}$ 和 $\hbar \omega_0 = 5 \text{ meV}$ 的情形. 注意出现在 $\hbar \omega_0 = 1 \text{ meV}$ 情况下的 $L = 4$ 非极化态在 $\hbar \omega_0 = 5 \text{ meV}$ 时消失

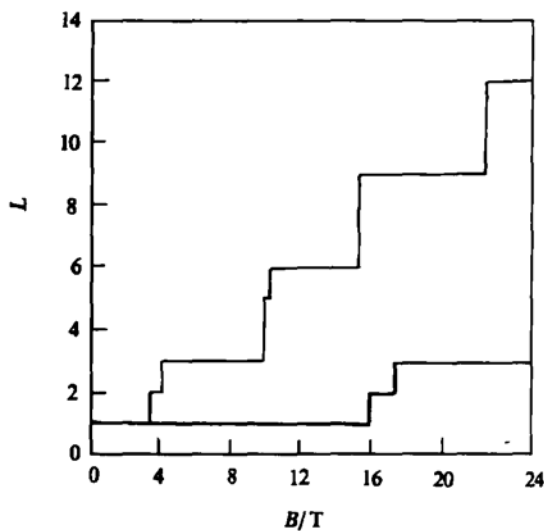


图3 基态在不同磁场范围内相应的角动量取值 其中细线和粗线分别表示 $h\omega_0 = 5 \text{ meV}$ 和 $h\omega_0 = 15 \text{ meV}$ 的情形. 注意极化态在 $h\omega_0 = 15 \text{ meV}$, $B > 17.37 \text{ T}$ 时才出现

此有关的我们还可以看到, 当约束势增强到 $h\omega_0 = 5 \text{ meV}$ 时, $L = 4$ 的非极化态让位于极化态而不再成为基态. 从图中我们还可以看到随着约束势的改变与某个 L 值基态相应的磁场范围也有所变化.

图3把 $h\omega_0 = 5 \text{ meV}$ 和 $h\omega_0 = 15 \text{ meV}$ 两种情形的相图叠合在一起. 从中看出在强约束势下 ($h\omega_0 = 5 \text{ meV}$), 只有当磁场强度 $B > 17.37 \text{ T}$ 时非极化态才让位于极化态而不再成为基态, 可见增强约束势后, 极化态成为基态需要增强磁场. 增强约束势与增大磁场是两种相反效应. 增强约束势物理上增强了电子的能量.

5 结果及讨论

从上面的数值计算结果中, 最重要的结论是:

(1) 一般地在低磁场范围, 非极化态为基态, 而在高磁场范围内, 极化态为基态, 因此 $L = 3k$ “幻数”角动量只适用于 $B > 4 \text{ T}$ 的磁场下. 这结果在物理上是可以解释的, 因为非极化态的能量要低于极化态, 氢分子就是可类比的明显例子. 这说明了为什么在零磁场及低磁场时基态为 $s = 1/2$ 非极化态. 只有在磁场增高后, 才具有足够的能量把逆磁场自旋反转. 这时极化态就成为基态, 这就解释了高磁场下何以极化态为基态. 这里还需注意的一点是, 在磁场为零的情况下, 基态能量随角动量 L 取值增加而增加, 因此系统从量子力学角度来看, 小角动量的基态具有较大的几率. 因此在零磁场下系统的基态是对应 $L = 0$ 和 1 的量子态.

(2) 当约束势 $\frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r^2$ 增大时, 即 ω_0 上升时, 极化态成为基态要在强磁场下才能出现. 其物理解释是增大约束势与增强磁场有不同的效应, 这一点从(3)式可以看出. 增大约束势物理上增加了电子的能量, 使非极化态比极化态更具优势. 因此只有在高的磁场下才能有足够的能量把逆磁场自旋反转.

从上述讨论, 可以见到我们的理论分析和计算结果是完全一致的. 少体理论方法在经过改进之后移植到少电子系统研究中是一个强有力的理论分析和计算工具, 把它应用在

量子点其他课题的研究正在进行中.

- [1] T. P. Smith III, K. Y. Lee, C. M. Knoedler, J. M. Honh and D. P. Kern, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 2172.
- [2] M. A. Kastner, *Rev. Mod. Phys.*, **64**(1992), 849.
- [3] C. Sikorski and U. Merkt, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 2164.
- [4] S. E. Laux, D. J. Frank and F. Stern, *Surf. Sci.*, **196**(1988), 101.
- [5] P. A. Maksym and T. Chakraborty, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 108; *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 1947.
- [6] N. F. Johnson and M. C. Payne, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 3819.
- [7] A. V. Madhav and T. Chakraborty, *Phys. Rev.*, **B49**(1994), 8163.
- [8] R. B. Laughlin, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3383.
- [9] S. M. Girvia and J. Jach, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 4506.
- [10] C. G. Bao, *Z. Phys.*, **D22**(1992), 557.
- [11] C. G. Bao, *Few-Body Systems*, **13**(1992), 41.
- [12] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer Verlag, 1974).
- [13] Wenying Ruan, Youyan Liu, C. G. Bao, Z. Q. Zhang, *Phys. Rev.*, **B51**(1995) (in press).

ELECTRONIC STATES OF QUANTUM DOTS SUBJECTED TO A MAGNETIC FIELD

GUO JIANG-MING RUAN WEN-YING LIU YOU-YAN

(Department of Physics, South China University of Technology, GuangZhou 510641)

(Received 2 March 1995)

ABSTRACT

The few-body theory has been extended to study the electronic properties of the quantum dots subjected to a magnetic field, which contains three electrons. We have analytically proved that the "magic angular momenta" are originated from the symmetries of the quantum mechanics. Based on the few-body theory, calculations confirm the conclusion stated above. The influences of magnetic field and confined potential on the ground states of three electron systems has been numerically calculated.

PACC: 7190; 6848