

三维量子点的三电子系统^{*}

解文方¹⁾

(广东工业大学数理系, 广州 510090)

(1996 年 2 月 29 日收到; 1996 年 4 月 12 日收到修改稿)

由量子力学对称性研究了三维量子点三电子系统的结构, 指出了存在“幻数”的可能性, 并与二维量子点三电子系统的“幻数”特征作了比较. 在有效质量近似下, 计算了抛物阱 ($\hbar\omega_0 = 2 \text{ meV}$) 三电子系统的能谱. 结果表明在三维三电子量子点中存在“幻数”的迹象, 但很少. 理论分析和计算结果都表明三维量子点三电子系统的基态是 1^- 态.

PACC: 7155; 7340

1 引 言

随着分子束外延等新兴科学技术的发展, 多层膜、量子阱和超晶格等人工微结构的研究和应用越来越广泛, 已发展成为一个引人注目的新领域. 近 10 多年来, 二维量子点、一维量子点等低维量子结构的实验和理论研究都取得了令人瞩目的进展^[1-3]. 由于计算的复杂性, 所以在三维量子点方面所做的理论工作相当少, 而这方面的实验工作已经开始^[4]. 在二维量子点中, 人们对“幻数”和量子 Hall 效应的起源一直没有很好的解释. 文献 [5] 从量子力学对称性出发, 给出了对二维量子点“幻数”起源的一个简单合理的解释. 作者最近的研究发现, 对量子少体系统, 量子力学对称性是十分重要的. 由于量子力学对称性的制约, 微观体系波函数中可能出现称之为内禀节面的节面结构, 而这些节面将决定体系的几何结构、内部运动及能级次序^[6,7]. 本文将根据量子力学对称性, 分析三维量子点三电子系统的结构和内部运动, 指出三维量子点中也可能存在“幻数”. 最后在有效质量近似下, 计算了抛物阱 ($\hbar\omega_0 = 2 \text{ meV}$) 三电子系统的能谱. 结果表明在三维三电子量子点中存在“幻数”的迹象, 但随着角动量的增加, “幻数”现象将不再明显.

2 物理模型和对称性分析

考虑三个有效质量为 m^* 的电子在

$$V(r) = m^* \omega_0^2 r^2 / 2 \quad (1)$$

的抛物阱中(能量以 meV , 距离以 10^{-9} m 为单位), 电子间的相互作用

^{*} 国家自然科学基金及广东省自然科学基金资助的课题.

¹⁾ 现在工作单位: 广州师范学院物理系, 广州 510400.

$$V_{ee}(r) = e^2/(4\pi\epsilon r), \quad (2)$$

其中 $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$.

对自旋为 $1/2$ 的三电子系统, 总自旋 $S=1/2$ 和 $3/2$. $S=3/2$ 态的空间部分对电子交换为反对称的, 而 $S=1/2$ 态则为混合对称的. 令 Ψ_{LMS} 为全反对称化的本征函数, 其中 L, M 为总角动量及其分量, 可展为

$$\Psi_{LMS} = \Phi_M^1(r, R) X_S^1(123) + \Phi_M^0(r, R) X_S^0(123), \quad (3)$$

其中

$$X_S^v = [(\xi(1)\xi(2))_v \xi(3)]_S \quad (v=1, 2), \quad (4)$$

r 和 R 为三体的 Jacobi 坐标 (见图 1), $\xi(i)$ 为单个电子的自旋态, v 为电子 1, 2 构成的子系统的自旋.

为了方便起见, 引入体轴 $i'-j'-k'$, 其中 k' 与三电子平面 σ 垂直, i' 与 R 平行 (见图 1), 所以本征函数可写为

$$\Psi_{LMS} = \sum_{Q=-L}^L D_{QM}^L(-\Omega) [\Phi_Q^1(r', R') X_S^1(123) + \Phi_Q^0(r', R') X_S^0(123)], \quad (5)$$

其中 Ω 表示固定系到体轴的欧拉旋转, r' 和 R' 为相对体轴的三体 Jacobi 坐标.

我们的研究发现, 量子系统的几何结构和稳定性主要取决于以下两个因素^[6,7]:

(1) 势能在多维坐标空间的拓扑结构.

(2) 由于量子力学对称性制约, 在多维坐标空间内出现的内禀节面的结构.

对于全同粒子系统, 势能的极值与几何对称性密切相关. 另一方面, 内禀节面则与

量子力学对称性 (即在转动、反演、粒子置换等作用下的对称性) 相关. 在二维情况下^[5], 当一个本征态不含内禀节面 (即不受量子力学对称性的限制), 它就可能拥有最好的几何结构 (波函数围绕位能最有利的构形进行分布), 这时它的能量会相对地较低, 它所具有的角动量称为幻角动量 (或幻数). 依照同样的原则可以推测, 三维量子点中的三电子系统的“幻数”与那些具有正三角形结构的本征态相联系, 所以了解“幻数”的关键在于对内禀节面的分析.

首先, 三电子平面 σ 围绕 k' 轴旋转 180° 与空间反演等价, 故 Φ_Q^S 必须满足

$$\pi(-1)^Q = 1. \quad (6)$$

其次, 当三电子 Jacobi 坐标 r 与 R 的夹角 θ 为 90° 时, 绕 i' 轴转 180° 等价于电子 1 和 2 的交换, 所以各 Φ_Q^S 的实部当 $\theta=90^\circ$ 时为零, 对应在多维坐标空间中出现一个节面. 最后, 若三个电子构成一个正三角形, 由于 Ψ_{LMS} 是全反对称的, 所以绕 k' 轴旋转 120° 等价于三个电子的一个轮换.

当 $S=1/2$ 时

$$X_{1/2}^1(231) = -\frac{1}{2} X_{1/2}^1(123) - \frac{\sqrt{3}}{2} X_{1/2}^0(123), \quad (7)$$

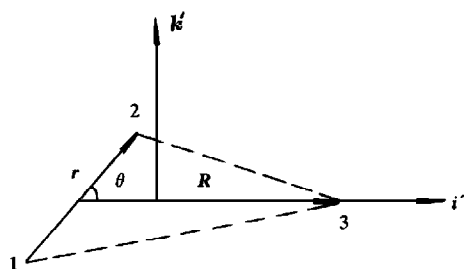


图 1 Jacobi 坐标和体轴

$$X_{1/2}^0(231) = \frac{\sqrt{3}}{2} X_{1/2}^1(123) - \frac{1}{2} X_{1/2}^0(123), \quad (8)$$

可得

$$e^{i2\pi Q/3} \left(-\frac{1}{2} \Phi_Q^1 + \frac{\sqrt{3}}{2} \Phi_Q^0 \right) = \Phi_Q^1, \quad (9)$$

$$e^{i2\pi Q/3} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \Phi_Q^1 - \frac{1}{2} \Phi_Q^0 \right) = \Phi_Q^0. \quad (10)$$

由(9)和(10)式可得

$$[1 + 2\cos(2\pi Q/3)] \Phi_Q^v = 0 \quad (v = 0 \text{ 或 } 1), \quad (11)$$

所以对于 $S=1/2$ 态, $Q=0, \pm 3, \pm 6, \dots$ 的组分对正三角形是禁止的.

当 $S=3/2$ 时, 显然有

$$X_{3/2}^1(231) = X_{3/2}^1(123) \quad (12)$$

和

$$X_{3/2}^0 = 0, \quad (13)$$

可得

$$(1 - e^{i2\pi Q/3}) \Phi_Q^1 = 0, \quad (14)$$

所以对于 $S=3/2$ 态, 仅有 $Q=0, \pm 3, \pm 6, \dots$ 的组分对正三角形是允许的.

从以上的分析, 可知量子力学对称性对波函数的各 Φ_Q^S 施加了限制, 但有些本征态, 它的诸 Φ_Q^S 中至少有一个不受限制. 这些本征态将以此 Φ_Q^S 为主要成分, 且具有正三角形结构. 这些具有正三角形结构的态构成五个转动带^[7], 即 $S=3/2$ 体系的 $Q^\pi = 1^+ (1_1^+, 3_1^+, \dots)$ 和 $3^- (3_1^-, 4_1^-, \dots)$ 带, 以及 $S=1/2$ 体系的 $Q^\pi = 1^- (1_1^-, 2_1^-, \dots), 2^+ (2_1^+, 3_1^+, \dots)$ 和 $4^+ (4_1^+, 5_1^+, \dots)$ 带.

另外还可看到, 对于 $S=3/2$ 的三电子体系, 1_1^+ 为能量最低态, $S=1/2$ 的三电子体系, 1_1^- 为能量最低态, 其中 1_1^+ 态以 $Q=0$ 成分为主, 1_1^- 态则以 $|Q|=1$ 成分为主, 显然在 $|Q|=1$ 成分中, 因转动惯量较大, 其转动能较小, 所以 $S=1/2$ 的 1_1^- 态应低于 $S=3/2$ 的 1_1^+ 态, 三维量子点中三电子体系的基态应是 1_1^- 态.

3 计算方法和结果

计算是在有效质量近似下进行的. 已知对于足够大的量子点, 有效质量近似会给出很好的计算结果. 对于三个电子组成的体系, 在 Jacobi 坐标中, 哈密顿量为

$$H = P_r^2/2\mu_r + P_R^2/2\mu_R + \sum_{i>j}^3 V(r_{ij}), \quad (15)$$

其中 $\mu_r = m^*/2$, $\mu_R = 3m^*/2$ 为折合质量,

$$V(r_{ij}) = (m^* \omega_0^2 r_{ij}^2)/6 + e^2/(4\pi\epsilon r_{ij}). \quad (16)$$

(15)式哈密顿量的本征函数, 可用一组谐振子乘积基

$$\tilde{\Phi}_i = \mathcal{A} \{ [\Phi_{n11}(\mathbf{r}) \Phi_{n22}(\mathbf{R})]_L X_S^v \} \quad (17)$$

来展开. 其中 $\mathcal{A}$ 为反对称化算符, Φ_{nl} 为谐振子态. (17) 式的反对称化可利用三体的 Talmi-Moshinsky 系数来实现^[8]. 我们取 $\hbar\omega_0 = 2 \text{ meV}$, $\epsilon_r = 13.1$, 利用文献[9]中的计算方法和文献[10]中的程序求解方程, 分别得到 $S=3/2$ 和 $1/2$ 体系的能谱, 见图 2(a) 和 (b).

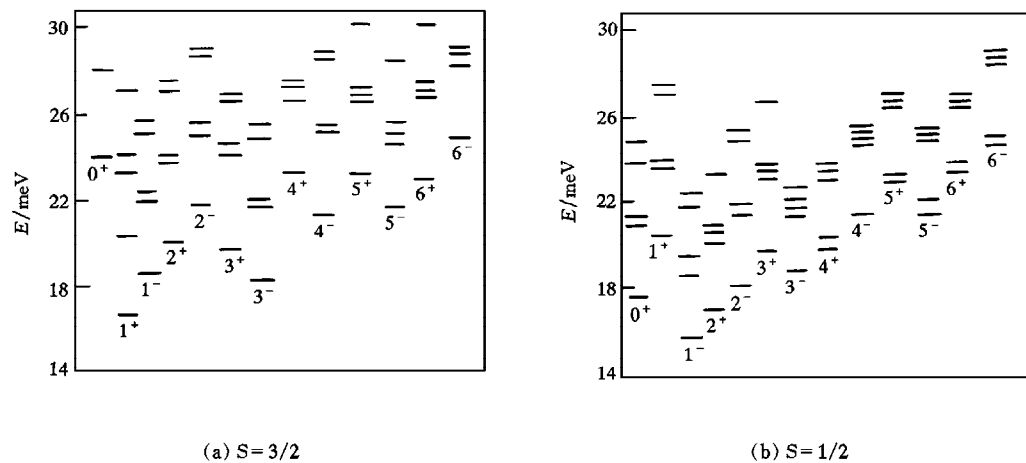


图 2 三电子系统的能谱

从图 2 可看出, $S=3/2$ 的转动带 $Q^\pi=1^+$ 和 3^- 各态, 以及 $S=1/2$ 的转动带 $Q^\pi=1^-, 2^+$ 和 4^+ 各态的能量相对而言要比其他态的能量低. 这些态的内部运动都是围绕正三角形的小振动^[7]. 还可看出, 组态 Φ_Q^S 取正三角形成分的 $|Q|$ 值越大, 能量则显著降低. 这是因为 $|Q|$ 值越大, 转动惯量越大, 其转动能越小, 组态就更稳定, 所以“幻数”更容易出现在这样的态上, 例如, $S=3/2$ 体系的 3^- 态, $S=1/2$ 体系的 1^- 态. 但是随着角动量的增加, “幻数”不再明显, 所以三维量子点中的“幻数”比二维量子点中的“幻数”要少得多, 并且只可能出现在角动量较小的态中, 另外还可看出, $S=1/2$ 的 1^- 态为能量最低态, 所以三维量子点中三电子体系的基态为 1^- 态.

- [1] N.F.Johnson, *J. Phys. : Condens. Matter*, **7**(1995), 965.
- [2] G.W.Bryant, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1985), 1140.
- [3] U.Merkt, J.Huser and M.Wagner, *Phys. Rev.*, **B43**(1993), 7320.
- [4] B.Meurer, D.Heitmann and K.Ploog, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 11488.
- [5] W.Y.Ruan, Y.Y.Liu, C.G.Bao and Z.Q.Zhang, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 7942.
- [6] 解文方、鲍诚光, 中国科学(A辑), **25**(1995), 1298.
- [7] 解文方、鲍诚光, 中国科学(A辑), **26**(1996), 147.
- [8] W.Tobocman, *Nucl. Phys.*, **A357**(1981), 293.
- [9] C.G.Bao *et al.*, *Few-Body Systems*, **2**(1987), 81.
- [10] Y.P.Gan, M.Z.Gong, C.E.Wu nad C.G.Bao, *Computer Phys. Commun.*, **34**(1985), 387.

THREE-ELECTRON SYSTEMS OF THREE-DIMENSIONAL QUANTUM DOTS

XIE WEN-FANG

(*Department of Mathematics and Physics, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510090*)

(Received 29 February 1996; revised manuscript received 12 April 1996)

ABSTRACT

The structures of three-electron systems of three-dimensional quantum dots are investigated via an analysis of quantum mechanical symmetry and the possibility of magic numbers existence is pointed out. We compared it with the magic numbers of three-electron systems of two-dimensional quantum dots. Within the effective-mass approximation, the energy spectra of three-electron systems in a parabolic potential ($\hbar\omega_0 = 2 \text{ meV}$) are calculated. The results show that there is the trace of the magic numbers existence. The ground state of three-electron systems of three-dimensional quantum dots is 1^- state.

PACC: 7155; 7340