

## 囚禁在电介质球形微腔中类氢原子的内部无序性\*

刘雪 王德华†

(鲁东大学物理与光电工程学院, 烟台 264025)

(2022年12月20日收到; 2023年3月21日收到修改稿)

给出了一种研究囚禁在微腔中类氢原子的内部无序性的一种方法, 即利用体系的量子信息熵和形状复杂度对囚禁体系的无序性进行表征和研究. 计算和分析了囚禁在  $\text{InN}$  电介质球形微腔中类氢原子的位置和动量空间中香农信息熵和形状复杂度, 重点探究了量子囚禁效应对体系无序性的影响. 计算结果表明: 当微腔半径较小时, 量子囚禁现象显著, 形状复杂度曲线中有一系列极值点, 这是由信息熵和空间不均匀性的共同作用引起的. 随着微腔半径增大, 囚禁现象减弱, 囚禁类氢原子的香农信息熵和形状复杂度趋近于自由空间类氢原子的情形. 为囚禁量子体系内部无序性的研究提供了一种有效方法, 对囚禁量子体系的信息测量提供了一定的参考.

**关键词:** 量子信息熵, 形状复杂度, 量子囚禁,  $\text{InN}$  电介质球形微腔

**PACS:** 03.65.Ge, 03.67.-a, 12.38.Aw, 77.84.-s

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222413

## 1 引言

囚禁原子的量子特性是原子和分子物理、化学物理中的一个前沿课题, 引起了理论和实验研究者的广泛关注<sup>[1-4]</sup>. 一方面, 囚禁原子的特性因量子囚禁效应而发生变化, 比如能谱、极化率、电离能、电子概率密度、化学反应性和跃迁概率等均与自由空间中的原子有很大不同. 例如, 囚禁在微腔中氢原子的能量简并现象消失, 能级结构出现重排, 在某些激发态之间存在能量交叉. 对此 Garza 等<sup>[5]</sup>和 Guerra 等<sup>[6]</sup>已经通过实验观测到囚禁的碱金属原子中的激发态电子可以从 s 态过渡到 d 态. 另一方面, 量子囚禁还会导致原子的电子概率密度出现局域-非局域化现象<sup>[7]</sup>. 基于以上这些显著的特性, 囚禁原子模型已经被用于量子点、量子阱或量子线中的类氢杂质态性质的研究<sup>[8-11]</sup>, 并且广泛应于高压物理<sup>[12]</sup>、天体物理<sup>[13]</sup>和半导体物理<sup>[14]</sup>等领域.

随着量子信息理论的发展, 各种量子系统的新奇现象都可以通过许多信息理论方法来解决. 量子系统的内部无序表现为电子概率密度的不均匀性, 可以利用不同的量子信息熵进行测量<sup>[15]</sup>. 在众多信息熵中, 香农信息熵应用于许多不同的领域<sup>[16-19]</sup>. 在量子物理中, 海森伯测不准原理  $\Delta r \cdot \Delta p \geq \hbar/2$  被 Bialynicki-Birula 和 Mycielski<sup>[20]</sup>所推导的熵测不准原理所取代:  $S_r + S_p \geq 3[1 + \ln(\pi)]$ . 基于 BBM 信息熵测不准原理, 可以通过研究量子系统的电子概率密度分布来刻画量子系统的无序程度. 在原子和分子物理中, 香农信息熵被用来测量相空间中电子密度的局域-非局域化特性和量子态的自旋极化等<sup>[21,22]</sup>. 形状复杂度与香农信息熵和平均电子概率密度的乘积有关, 所以它可以比较清晰地描述系统有序与无序之间的平衡程度, 形状复杂度也可用于研究量子系统的内部无序性. 形状复杂度在复合材料信息论测量中占有重要地位, 受到了众多物理学家的关注. 早在 1995 年, López-Ruiz, Mancini

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11374133) 和山东省自然科学基金 (批准号: ZR2019MA066) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lduwdh@163.com

和 Calbet (LMC) [23] 提出了物理系统统计复杂性的度量方法, 并且应用该方法研究了非平衡孤立系统的复杂度 [24]. 随后, Angulo 和 Antolín [25] 计算了位置和动量中的 LMC 复杂度. Dehesa 等 [15] 研究了  $D$  维类氢原子系统在位置和动量空间中的形状复杂度, 并提出量子体系的内部无序性与电子概率密度的不均匀性密切相关. 最近, Sangita 等 [26] 对囚禁在真空微腔中的氢原子的无序性和复杂度进行了研究, 但是对于囚禁在非真空微腔中氢原子的无序性, 没有给予分析.

近年来, 人们对半导体材料的研究和应用逐渐深入. 由于独特的光电特性, 实验上已经设计和制备了多种 InN 基纳米电子和光学器件, 并对 InN 电介质材料的光学性质和电子结构进行了大量研究 [27–32]. 但是到目前为止, 未见对囚禁在 InN 电介质微腔中原子的内部特性的研究报道. 因此, 本研究借助香农信息熵和形状复杂度研究了囚禁在 InN 电介质微腔中的类氢原子的无序性, 重点探讨了量子囚禁效应对类氢原子内部无序性的影响. 通过与囚禁在真空球形微腔中类氢原子的香农信息熵和形状复杂度的比较发现, 对于尺寸较小的球形微腔, 香农信息熵和形状复杂度的差异非常明显; 然而, 当球形微腔半径较大时, 这种差异可以忽略不计, 囚禁在微腔中类氢原子的位置和动量形状复杂度都接近于自由氢原子的情况 [33]. 本研究在囚禁原子的量子信息测量中具有一定的实际应用价值, 并对半导体量子点中类氢杂质的无序或混沌特性的研究提供了一定的参考.

## 2 理论模型

### 2.1 囚禁在 InN 电介质球形微腔中类氢原子的本征能量和本征波函数

假设类氢原子位于半径为  $r_a$  的 InN 电介质球形微腔的中心, 在原子单位制中, 该系统的哈密顿量为

$$H = -\frac{1}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Z}{\varepsilon_r r} + V(r), \quad (1)$$

其中  $\mu$  为类氢原子质量,  $Z$  为原子序数,  $\varepsilon_r$  为相对介电常数. 对于 InN 电介质材料:  $\varepsilon_r = 15.3$ . 本文选取  $\mu=1$ ,  $Z=1$ .

$V(r)$  为电介质球形微腔的囚禁势:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 < r < r_a, \\ +\infty, & r \geq r_a. \end{cases} \quad (2)$$

囚禁在 InN 电介质球形微腔中类氢原子的薛定谔方程可表示为

$$\left[ -\frac{1}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Z}{\varepsilon_r r} + V(r) \right] \psi = E\psi, \quad (3)$$

在球坐标系中, (3) 式可以写为

$$\left[ -\frac{1}{2\mu} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l^2}{2\mu r^2} - \frac{Z}{\varepsilon_r r} \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi), \quad (4)$$

其中  $\psi(r < r_a, \theta, \varphi)$  为 InN 电介质球形微腔内氢原子的波函数, 在球形微腔的外部区域,  $\psi(r \geq r_a, \theta, \varphi) = 0$ .

在中心势场中, 由于球对称性, 波函数  $\psi(r, \theta, \varphi)$  可以表示为  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , 其中  $R(r)$  是径向波函数,  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  是球谐函数.  $R(r)$  满足下面的方程:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{dR(r)}{dr} + \left[ 2\mu \left( E - \frac{Z}{\varepsilon_r r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad (5)$$

令  $\xi = \beta r$ ,  $\beta^2 = -8\mu E$ ,  $\alpha = \frac{2\mu Z}{\varepsilon_r \beta}$ , (5) 式变化为

$$\frac{\partial^2 R(\xi)}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi} \cdot \frac{\partial R(\xi)}{\partial \xi} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\alpha}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] R(\xi) = 0, \quad (6)$$

设  $R(\xi) = \xi^{-1}F(\xi)$ , (6) 式变成

$$\frac{\partial^2 F(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\alpha}{\xi} + \frac{1/4 - (l+1/2)^2}{\xi^2} \right] F(\xi) = 0. \quad (7)$$

(7) 式是一个超几何方程, 其解为

$$F_{\alpha, l}(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{l+1} F(l+1-\alpha, 2l+2, \xi), \quad (8)$$

其中  $F(l+1-\alpha, 2l+2, \xi)$  是超几何函数.

去除变量代换后, (5) 式的解为

$$R(r) = e^{-\beta r/2} (\beta r)^l F\left(l+1 - \frac{2\mu Z}{\varepsilon_r \beta}, 2l+2, \beta r\right), \quad (9)$$

考虑到边界条件:

$$F\left(l+1 - \frac{2\mu Z}{\varepsilon_r \beta}, 2l+2, \beta r\right) \Big|_{r=r_a} = 0, \quad (10)$$

可以通过求解 (10) 式的根得到  $\beta$  的值, 进而得到囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的本征能:

$$E = -\beta^2/(8\mu).$$

位置空间中的归一化波函数可表示为

$$\psi(r, \theta, \varphi) = A_r e^{-\beta r/2} (\beta r)^l \times F\left(l+1 - \frac{2\mu Z}{\varepsilon_r \beta}, 2l+2, \beta r\right) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (11)$$

其中  $A_r$  为归一化常数:

$$A_r = \sqrt{\left| \int_0^{r_a} r^2 |R(r)|^2 dr \right|^{-1}}. \quad (12)$$

对位置空间中的径向波函数进行球形贝塞尔变换得到动量空间中的波函数  $\hat{R}(p)$ :

$$\hat{R}(p) = (-1)^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{r_a} r^2 R(r) j_l(pr) dr, \quad (13)$$

其中  $j_l(x)$  是  $l$  阶球贝塞尔函数.

动量空间中的归一化波函数为

$$\Phi(p, \theta_p, \varphi_p) = B_p \hat{R}(p) Y_{lm}(\theta_p, \varphi_p), \quad (14)$$

其中  $B_p$  为归一化常数:

$$B_p = \sqrt{\left| \int_0^\infty p^2 |\hat{R}(p)|^2 dp \right|^{-1}}. \quad (15)$$

位置空间和动量空间中的电子概率密度分别为

$$\rho(r, \theta, \phi) = |\psi(r, \theta, \phi)|^2, \quad (16)$$

$$\prod(p, \theta_p, \varphi_p) = |\Phi(p, \theta_p, \varphi_p)|^2. \quad (17)$$

利用 (16) 式和 (17) 式, 计算了囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的不同的量子态在位置空间和动量空间中的电子概率密度, 假设球形微腔的半径  $r_a = 10$  a.u. (若无特殊强调,  $r_a$  单位均为 a.u.). 图 1(a) 给出了 1s, 2s, 3s 及 4s 态在位置空间的电子概率密度分布图. 由图 1(a) 可以看出, 1s 态位置空间概率密度仅有一个峰值, 其他态的概率密度均出现振荡, 产生一系列峰值, 节点数随着量子数  $n$  的增加而增加. 此外, 对于不同的 s 态, 位置空间的径向概率密度的最大高度随  $n$  的增加而增加. 量子数  $n$  越大, 其最大高度越高. 图 1(b) 为 2p, 3p 以及 4p 态在位置空间的电子概率密度分布图. 由图 1(b) 可知, 2p 态的位置空间概率密度也仅有一个峰值, 3p 和 4p 态也存在振荡, 节点数和最大高度均与 s 态的变化相同. 图 1(c) 和图 1(d) 中给出了囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的不同的量子态在动量空间中径向电子概率密度. 与位置空间的径向电子概率密度相同, 对于 1s 和 2p 态, 动

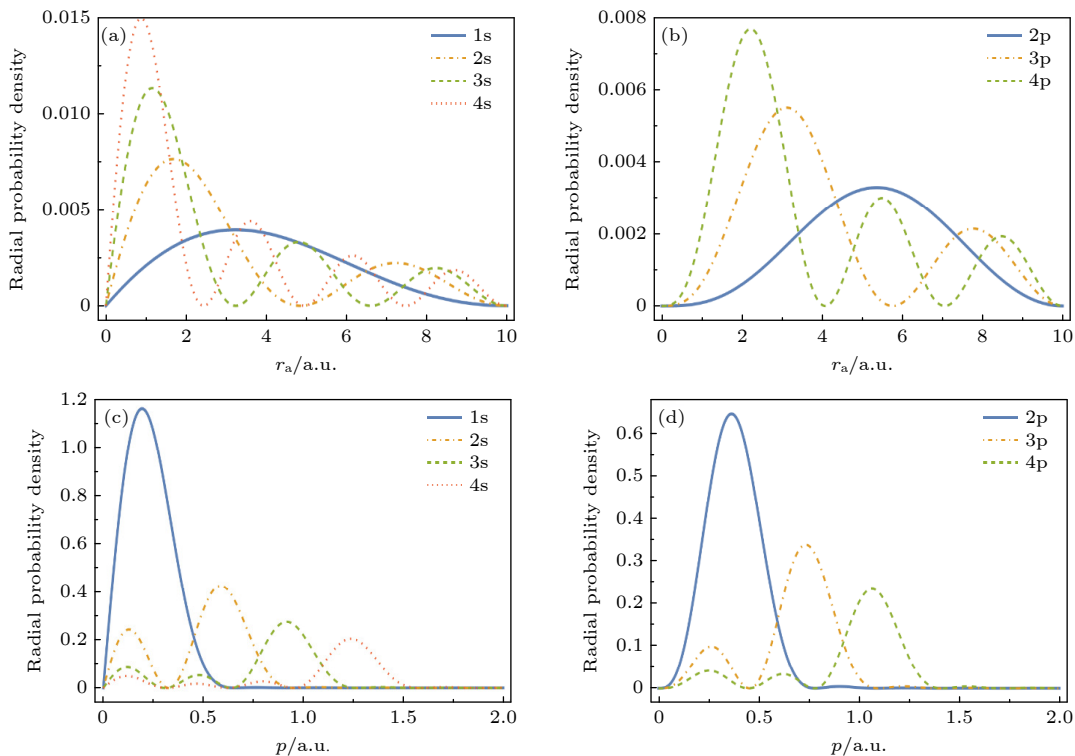


图 1 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的不同的量子态在位置空间和动量空间中的径向概率密度分布, 假设球形微腔的半径  $r_a = 10$

Fig. 1. Position space and momentum space radial probability density for different quantum states of hydrogen atom in the InN dielectric spherical microcavity, suppose the radius of spherical microcavity  $r_a = 10$ .

量空间的径向电子概率密度仅有一个峰值. 对于其他量子态, 概率密度分布中均存在多个峰值, 节点数也同样随着量子数  $n$  的增加而增加. 但是对于不同的  $s$  态和  $p$  态, 径向概率密度的最大高度随量子数  $n$  的增加而减小. 结果表明, 由于量子囚禁效应, 囚禁在  $\text{InN}$  电介质球形微腔中氢原子的电子密度分布具有非均匀性.

## 2.2 囚禁在 $\text{InN}$ 电介质球形微腔中类氢原子的香农信息熵和形状复杂度

在量子信息论中, 系统的内部无序性表现为电子概率密度的非均匀性, 可通过香农信息熵及形状复杂度来测量. 位置空间和动量空间中的香农信息熵  $S_r$  和  $S_p$  的定义如下:

$$S_r = - \int \rho(r, \theta, \varphi) \ln[\rho(r, \theta, \varphi)] r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi, \quad (18)$$

$$S_p = - \int \prod(p, \theta_p, \varphi_p) \ln \left[ \prod(p, \theta_p, \varphi_p) \right] p^2 \times \sin\theta_p dp d\theta_p d\varphi_p. \quad (19)$$

香农信息熵和  $S_i = S_r + S_p$ . 通过对  $S_r$ ,  $S_p$  和  $S_i$  进行计算分析, 可以给出位置空间和动量空间中电子概率密度的不确定关系.

形状复杂度与系统的香农信息熵和平均电子概率密度 (又称不平衡度) 有关. 在位置空间中, 形状复杂度  $C[r]$  定义为

$$C[r] = \exp(S_r + \ln\langle r \rangle), \quad (20)$$

其中  $\langle r \rangle$  为位置空间中的平均电子概率密度:

$$\langle r \rangle = \int [\rho(r, \theta, \varphi)]^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi, \quad (21)$$

在动量空间中, 形状复杂度  $C[p]$  定义为

$$C[p] = \exp(S_p + \ln\langle p \rangle), \quad (22)$$

其中  $\langle p \rangle$  为动量空间中的平均电子概率密度:

$$\langle p \rangle = \int \left[ \prod(p, \theta_p, \varphi_p) \right]^2 p^2 \sin\theta_p dp d\theta_p d\varphi_p. \quad (23)$$

## 3 结果与讨论

由第 2 节分析可知,  $\text{InN}$  电介质球形微腔中氢原子的本征能与微腔的半径有关. 计算了在不同囚禁半径下,  $\text{InN}$  电介质球形微腔中氢原子的前几个束缚态的本征能在表 1 列出. 可以看出, 当  $\text{InN}$  电介质球形微腔的囚禁半径非常小时 ( $r_a = 0.5$ ), 微腔的量子囚禁效应起主要作用, 氢原子的能量为正. 随着球形微腔半径的增大, 能量逐渐减小变为负值. 对于  $1s$  态, 当  $r_a > 28.079$  时, 能量为负值. 当球形微腔半径很大时, 能量趋近于某一给定值.

图 2 给出了在给定半径下,  $\text{InN}$  电介质球形微腔中氢原子在不同态下的本征能的变化. 图 2(a) 将微腔半径固定为  $r_a = 10$ , 发现微腔的囚禁效应打破了能级简并, 某些态之间存在能量交叉, 这与实验中观察到的被囚禁碱金属原子类似<sup>[5,6]</sup>, 束缚态的能级顺序为:  $E_{1s} < E_{2p} < E_{3d} < E_{2s} < E_{4f} < E_{3p} < E_{4d} < E_{3s} < E_{4p} < E_{4s}$ . 随着微腔半径的增大, 能量简并度逐渐恢复. 如图 2(c) 所示,  $r_a = 200$ ,  $E_{2p} \approx E_{2s}$ . 当半径足够大时 ( $r_a = 500$ ), 见图 2(d), 能量简并完全恢复:  $E_{2p} = E_{2s}$ ,  $E_{3d} = E_{3p} = E_{3s}$ ,  $E_{4f} = E_{4d} = E_{4p} = E_{4s}$ .

表 1  $\text{InN}$  电介质球形微腔中氢原子在不同囚禁半径下的前几个态的本征能

Table 1. Intrinsic energy of the first few states of hydrogen atoms at different confinement radii in  $\text{InN}$  dielectric spherical microcavity.

$r_a/\text{a.u.}$	0.5	10	30	50	100	200	300	500
1s	19.42009	0.03291	-0.00042	-0.00192	-0.00213	-0.00214	-0.00214	-0.00214
2s	78.54949	0.17680	0.01493	0.00365	-0.00011	-0.00053	-0.00053	-0.00053
2p	40.13943	0.08877	0.00709	0.00152	-0.00032	-0.00053	-0.00053	-0.00053
3s	177.19306	0.42100	0.04155	0.01305	0.00208	-0.00001	-0.00021	-0.00024
3p	119.05181	0.28297	0.02797	0.00880	0.00138	-0.00007	-0.00022	-0.00024
3d	66.22135	0.15538	0.01486	0.00447	0.00056	-0.00016	-0.00023	-0.00024
4s	315.33012	0.76461	0.07935	0.02653	0.00536	0.00074	0.00009	-0.00012
4p	237.44938	0.57693	0.06017	0.02023	0.00415	0.00057	0.00005	-0.00012
4d	165.17213	0.40025	0.04149	0.01385	0.00277	0.00034	-0.00001	-0.00013
4f	97.46420	0.23423	0.02381	0.00777	0.00143	0.00010	-0.00008	-0.00013

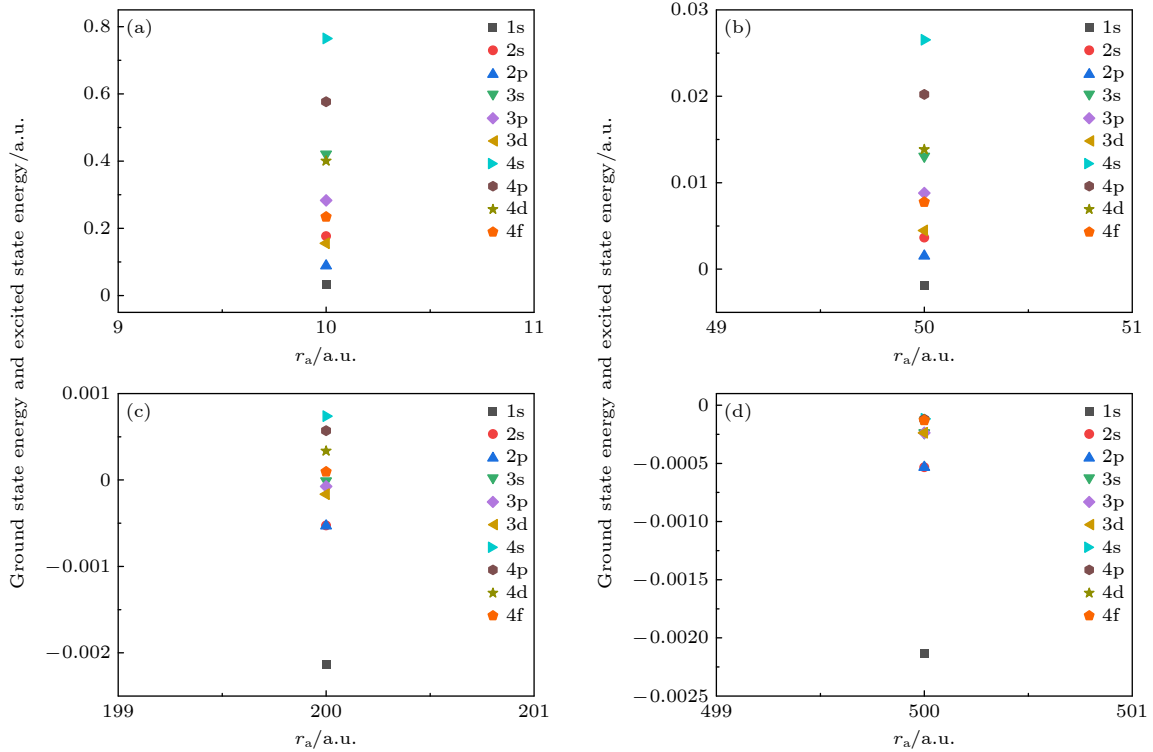

 图 2 InN 电介质球形微腔内氢原子前几个态的本征能 (a)  $r_a = 10$ ; (b)  $r_a = 50$ ; (c)  $r_a = 200$ ; (d)  $r_a = 500$ 

 Fig. 2. Intrinsic energy of the first few states of hydrogen atom in the InN dielectric spherical microcavity: (a)  $r_a = 10$ ; (b)  $r_a = 50$ ; (c)  $r_a = 200$ ; (d)  $r_a = 500$ .

由图 1 可以看出, 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的量子态的电子概率密度分布是非均匀性的. 电子密度的不均匀性是囚禁氢原子内部无序性的表现, 可以用香农信息熵和形状复杂度来测量. 表 2 列出了在不同半径的 InN 电介质球形微腔中氢原子的前几个 s 态在位置和动量空间中的香农信息熵和形状复杂度.

为了更清楚地看出量子囚禁效应对位置空间中香农信息熵和形状复杂度的影响, 给出了对应前几个 s 态的香农信息熵和形状复杂度随 InN 电介质球形微腔半径的变化曲线, 如图 3—图 5 所示.

图 3 给出了 1s 态的香农信息熵和形状复杂度随 InN 电介质球形微腔半径的变化关系, 为了便于比较, 还给出了囚禁在真空球形微腔中氢原子的 1s 态的香农信息熵和形状复杂度. 图 3(a) 给出了在位置空间和动量空间中的香农信息熵  $S_r$  和  $S_p$  随半径  $r_a$  的变化. 结果表明, 当  $r_a$  很小时, 球形微腔的量子囚禁效应非常显著,  $S_r$  值为负, 说明电子态密度是局域性的; 当增加  $r_a$  时,  $S_r$  值为正并且单调增加, 此时电子态的密度呈现出非局域性. 相反, 动量空间中的香农信息熵  $S_p$  值在囚禁半径较

小时为正, 随着半径的增大,  $S_p$  值单调减小变为负值. 当  $r_a > 100$  时, 球形微腔的量子囚禁效应很弱,  $S_r$  和  $S_p$  都接近一个恒定值. 由图 3(a) 还可以看出, 在相同  $r_a$  下, 囚禁在 InN 球微腔中氢原子  $S_r$  和  $S_p$  的绝对值大于真空球形微腔的结果. 图 3(b) 显示了位置空间和动量空间中平均电子概率密度  $\ln\langle r \rangle$  和  $\ln\langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化. 由图中可以看出, 随着  $r_a$  的增大,  $\ln\langle r \rangle$  单调递减,  $\ln\langle p \rangle$  单调递增, 这与  $S_r$  和  $S_p$  的变化相反. 图 3(b) 也表明, 当  $r_a$  相同时, 囚禁在 InN 电介质球形微腔中 1s 态氢原子的  $\ln\langle r \rangle$  和  $\ln\langle p \rangle$  的绝对值要大于真空球形微腔的情况. 图 3(c) 显示了位置空间的形状复杂度  $C[r]$  随  $r_a$  的变化曲线.  $C[r]$  随  $r_a$  的增大而单调递增至一个给定值, 原因由 (20) 式和 (22) 式可以看出, 形状复杂度  $C[r]$  是由两部分组成: 一部分是香农信息熵  $S_r$ ; 另一部分是平均电子概率密度  $\ln\langle r \rangle$ . 香农信息熵和平均电子概率密度随  $r_a$  的变化具有相反的行为, 如图 3(a), (b) 所示. 在给定的囚禁半径下, 位置空间中熵  $S_r$  对形状复杂度的相对贡献大于平均电子概率密度  $\ln\langle r \rangle$ , 所以导致位置空间的形状复杂度  $C[r]$  随  $r_a$  的增大而增大.

表 2 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子 1s, 2s, 3s 和 4s 态在位置和动量空间中的香农信息熵和形状复杂度随半径的变化

Table 2. Variation of Shannon information entropy and shape complexity in the position and momentum spaces of 1s, 2s, 3s and 4s states for hydrogenic atom confined in the InN dielectric spherical microcavity as a function of the radius of the microcavity.

$r_a/\text{a.u.}$	0.5	2	4	6	10	40	100	400	1000	1500	
1s	$S_r$	-1.4078	2.7388	4.8012	5.9998	6.8441	7.4938	11.2125	12.3083	12.3283	12.3283
	$S_p$	8.0224	3.8677	1.7946	0.5856	0.2690	-0.9287	-4.7199	-5.7473	-5.7617	-5.7617
	$C[r]$	1.3238	1.3331	1.3463	1.3604	1.3754	1.3915	1.7729	2.4742	2.5107	2.5107
	$C[p]$	1.5156	1.5110	1.5053	1.5002	1.4959	1.4924	1.6081	2.3007	2.3545	2.3545
2s	$S_r$	-1.6182	2.5393	4.6173	5.8324	6.6945	7.3633	11.5600	14.5011	16.2944	16.2945
	$S_p$	9.8106	5.6517	3.5722	2.3561	1.4934	0.8246	-3.3163	-6.3549	-8.9410	-8.9411
	$C[r]$	2.3122	2.3318	2.3584	2.3857	2.4135	2.4420	2.8872	2.6978	2.5882	2.5883
	$C[p]$	1.2987	1.2991	1.3004	1.3027	1.3059	1.3104	1.6255	3.5705	3.5862	3.5862
3s	$S_r$	-1.6941	2.4651	4.5451	5.7622	6.6260	7.2964	11.4868	14.3744	18.4189	18.6100
	$S_p$	10.7698	6.6122	4.5347	3.3205	2.4598	1.7931	-2.2946	-4.8614	10.0304	10.3718
	$C[r]$	3.2965	3.3183	3.3476	3.3772	3.4071	3.4372	3.8912	4.3150	2.4249	2.5897
	$C[p]$	1.2959	1.2934	1.2900	1.2866	1.2833	1.2802	1.2566	1.6164	4.9245	5.3478
4s	$S_r$	-1.7332	2.4264	4.5068	5.7242	6.5883	7.2589	11.4435	14.2816	18.7984	20.2300
	$S_p$	11.4216	7.2638	5.1857	3.9710	3.1098	2.4425	-1.6559	-4.1749	-8.9360	11.2692
	$C[r]$	4.2798	4.3022	4.3323	4.3624	4.3927	4.4230	4.8733	5.4856	3.3059	2.5188
	$C[p]$	1.3205	1.3193	1.3173	1.3153	1.3134	1.3115	1.2917	1.3738	3.2785	7.1624

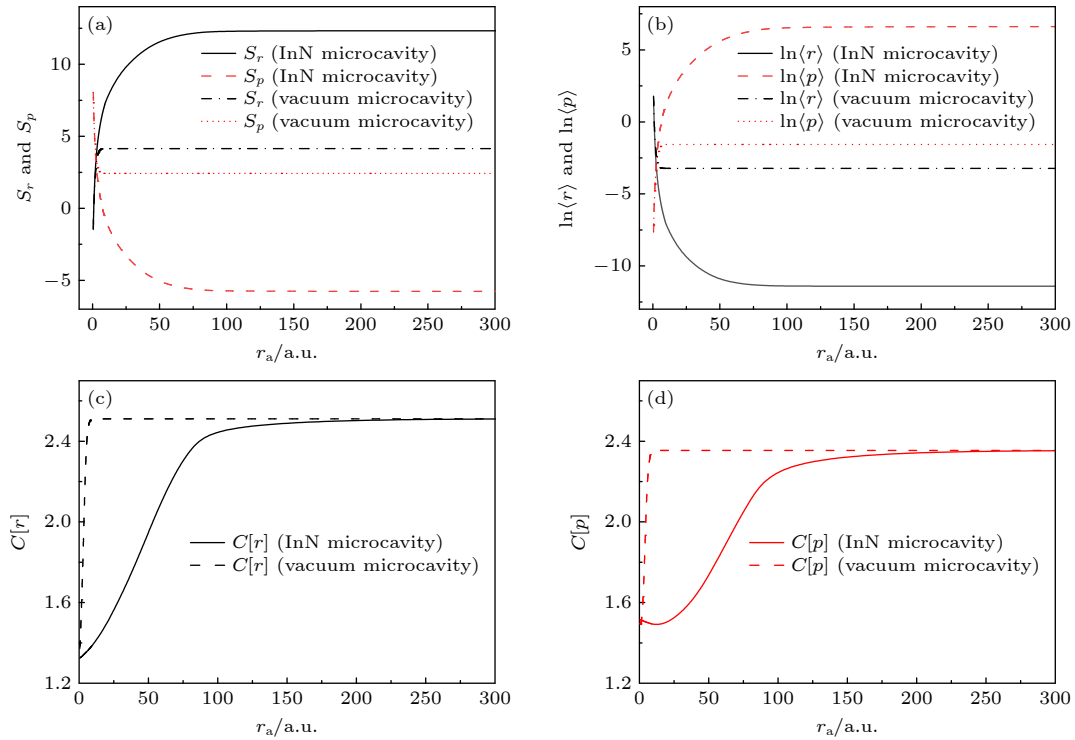


图 3 囚禁在 InN 电介质球形微腔和真空球形微腔中氢原子的 1s 态的香农信息熵和形状复杂度随半径的变化 (a) 位置空间和动量空间中的香农信息熵  $S_r$  和  $S_p$ ; (b) 位置空间和动量空间的平均电子概率密度  $\ln\langle r \rangle$  和  $\ln\langle p \rangle$ ; (c) 位置空间的形状复杂度  $C[r]$ ; (d) 动量空间中的形状复杂度  $C[p]$

Fig. 3. Shannon information entropy and shape complexity as a function of the radius of the microcavity for the 1s state of the hydrogen atom confined in the InN dielectric spherical microcavity and vacuum spherical microcavity: (a) Shannon information entropy in the position space  $S_r$  and in the momentum space  $S_p$ ; (b) averaging electron probability density in the position space  $\ln\langle r \rangle$  and in the momentum space  $\ln\langle p \rangle$ ; (c) shape complexity in the position space  $C[r]$ ; (d) shape complexity in the momentum space  $C[p]$ .

由图 3 还可以发现, 当球形微腔的尺寸较小时,  $\text{InN}$  微腔中的  $C[r]$  的值与真空微腔的值有很大的不同. 然而, 当球形微腔的半径较大时, 囚禁在  $\text{InN}$  电介质球形微腔内氢原子的  $C[r]$  接近于真空微腔内氢原子的  $C[r]$  值, 并且  $C[r]$  的极限值趋近于自由氢原子的情况<sup>[28]</sup>,  $C[r] \rightarrow 2.5107$ . 图 3(d) 给出了动量空间  $C[p]$  中的形状复杂度随  $r_a$  的变化曲线. 当囚禁半径比较小时,  $C[p]$  随着  $r_a$  的增大而减小. 与真空微腔的  $C[p]$  相比, 可以看出随  $r_a$  的增大, 二者之间的差异减小. 当  $r_a > 200$  时, 微腔的量子囚禁效应对形状复杂度的影响可以忽略, 囚禁在  $\text{InN}$  电介质球形微腔中的氢原子的  $C[p]$  趋近于恒定值,  $C[p] \rightarrow 2.3545$ , 与自由氢原子的  $C[p]$  值一致. 与  $C[r]$  曲线相比, 二者随  $r_a$  的变化趋势基本相同, 说明在坐标空间和动量空间中, 囚禁在  $\text{InN}$  电介质球形微腔中的氢原子基态的形状复杂性基本是一致的. 由图 3 还可以看出, 囚禁在球形微腔内氢原子的香农信息熵和形状复杂度不仅与微腔半径有关, 还与微腔内填充材料的相对电介质常数有关.

对囚禁在  $\text{InN}$  电介质球形微腔中氢原子的  $2s$  态的香农信息熵和形状复杂度随半径的变化进行了分析, 结果如图 4 所示. 图 4(a) 给出了  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln\langle r \rangle$  和  $\ln\langle p \rangle$  随半径的变化曲线. 可以看到, 在位置空间中, 微腔半径越小, 香农信息熵  $S_r$  越小, 说明系统越有序; 而平均电子概率密度  $\ln\langle r \rangle$  较大, 表明系统是无序的. 随着  $r_a$  的增大,  $S_r$  单调增加,  $\ln\langle r \rangle$  单调减小, 表明囚禁氢原子在有序和无序之间变化. 相反, 在动量空间中, 香农信息熵  $S_p$  最大, 说

明系统是无序的; 而平均电子概率密度  $\ln\langle p \rangle$  较小, 说明系统是有序的. 随着  $r_a$  的增大,  $S_p$  减小,  $\ln\langle p \rangle$  随  $r_a$  单调增加, 表明系统在无序和有序之间变化. 图 4(b) 中黑色线给出了形状复杂度  $C[r]$  随  $r_a$  的变化情况. 和  $1s$  态的情况不同, 形状复杂度曲线中出现了一些新奇的现象. 在  $C[r]$ - $r_a$  曲线上出现了 2 个极值点, 这取决于香农信息熵和平均电子概率密度随  $r_a$  的变化曲线的斜率. 具体分析如下: 将  $C[r]$  对  $r_a$  求导, 得到

$$\frac{\partial C[r]}{\partial r_a} = C[r] \left\{ \frac{\partial S_r}{\partial r_a} + \frac{\partial \ln\langle r \rangle}{\partial r_a} \right\}. \quad (24)$$

当  $r_a$  较小时,  $S_r$ - $r_a$  曲线的斜率大于  $\ln\langle r \rangle$ - $r_a$  的斜率,  $|\partial S_r / \partial r_a| > |\partial \ln\langle r \rangle / \partial r_a|$ , 导致  $\partial C[r] / \partial r_a > 0$ , 所以  $C[r]$  随着  $r_a$  的增大而增大. 当  $r_a = 63.03$  时,  $|\partial S_r / \partial r_a| = |\partial \ln\langle r \rangle / \partial r_a|$ , 因此在该半径处有最大值. 当  $63.03 < r_a < 337.18$  时,  $|\partial S_r / \partial r_a| < |\partial \ln\langle r \rangle / \partial r_a|$ , 导致  $\partial C[r] / \partial r_a < 0$ , 所以  $C[r]$  随着  $r_a$  的减小而减小. 当  $r_a = 337.18$  时,  $|\partial S_r / \partial r_a| = |\partial \ln\langle r \rangle / \partial r_a|$ , 因此在这个半径处出现一个最小值. 当  $r_a > 337.18$  时,  $|\partial S_r / \partial r_a| > |\partial \ln\langle r \rangle / \partial r_a|$ ,  $\partial C[r] / \partial r_a > 0$ , 所以  $C[r]$  再次随着  $r_a$  增加, 直到达到一个恒定值.

图 4(b) 中红色曲线给出了  $C[p]$ - $r_a$  曲线. 可以看出,  $C[p]$  曲线的形状不同于  $C[r]$  曲线, 只有一个最大值点, 该极值点的物理起源同样可以根据  $S_p$ - $r_a$  曲线的斜率和  $\ln\langle p \rangle$ - $r_a$  曲线的斜率比较分析. 此外, 当微腔半径较小时,  $r_a < 77.36$ , 位置空间中的形状复杂度  $C[r]$  起主要作用,  $C[r] > C[p]$ . 随着  $r_a$  的增大, 动量空间中的形状复杂度  $C[p]$  迅速上升并起主导作用,  $C[p] > C[r]$ . 图 4(b) 还给出

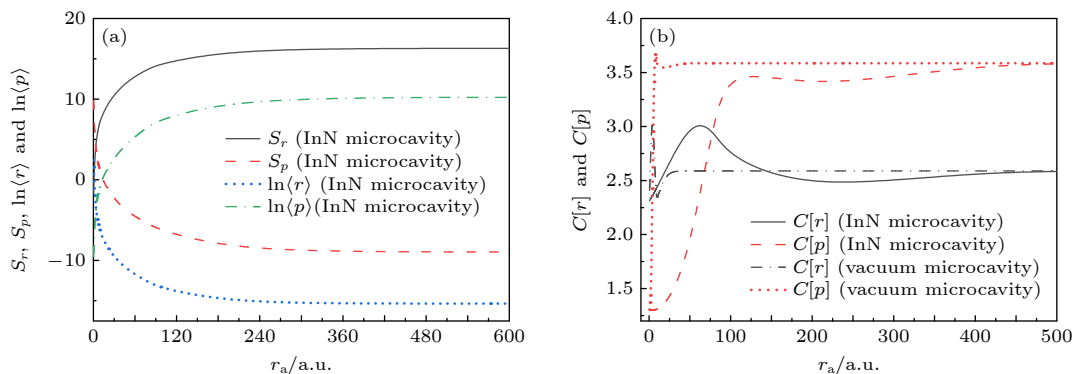


图 4 囚禁在  $\text{InN}$  电介质球形微腔中和真空球形微腔中氢原子的  $2s$  态的香农信息熵和形状复杂度随微腔半径的变化曲线 (a)  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln\langle r \rangle$  和  $\ln\langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化曲线; (b) 在位置空间和动量空间中形状复杂度  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化曲线

Fig. 4. Shannon information entropy and shape complexity as a function of the radius of the microcavity for the  $2s$  state of the hydrogen atom confined in the  $\text{InN}$  dielectric spherical microcavity and vacuum spherical microcavity: (a) Variation of  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln\langle r \rangle$  and  $\ln\langle p \rangle$  with  $r_a$ ; (b) variation of shape complexity in the position space  $C[r]$  and in the momentum space  $C[p]$  with  $r_a$ .

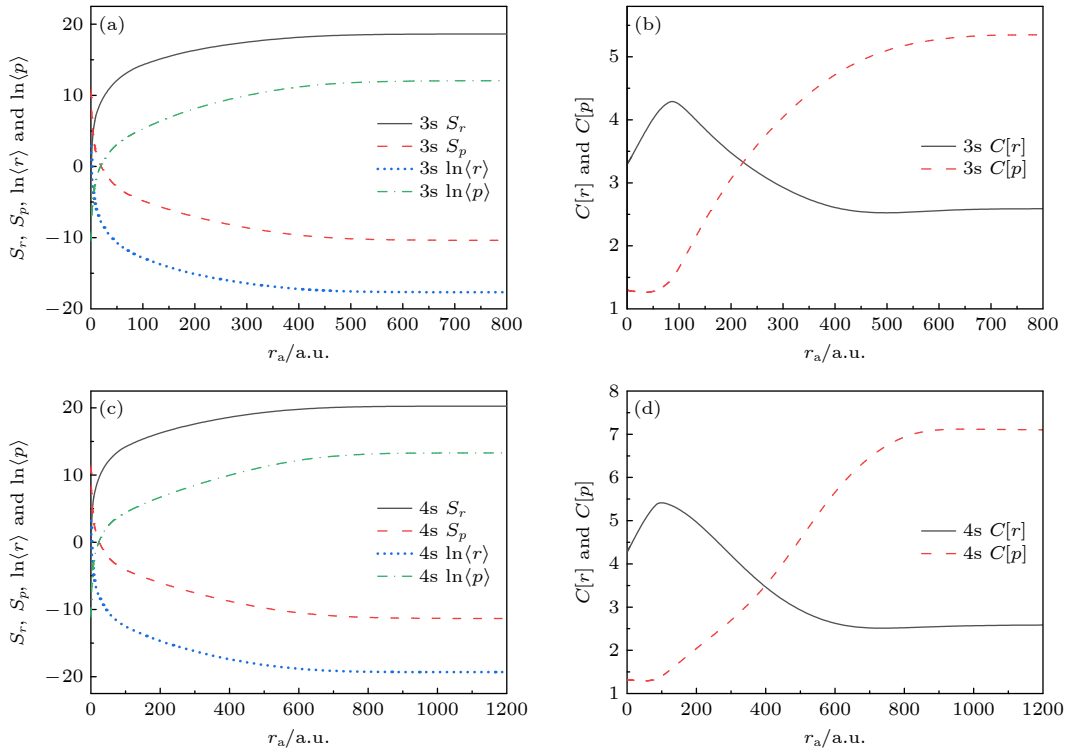


图 5 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的 3s 态和 4s 态的香农信息熵和形状复杂度随微腔半径的变化曲线 (a) 3s 态  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  和  $\ln \langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化; (b) 3s 态的  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化; (c) 4s 态  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  和  $\ln \langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化; (d) 4s 态的  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化

Fig. 5. Shannon information entropy and shape complexity as a function of the radius of the InN dielectric spherical microcavity for the 3s state and 4s state: (a) Variation of  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  and  $\ln \langle p \rangle$  with  $r_a$  for the 3s state; (b) variation of  $C[r]$  and  $C[p]$  with  $r_a$  for the 3s state; (c) variation of  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  and  $\ln \langle p \rangle$  with  $r_a$  for the 4s state; (d) variation of  $C[r]$  and  $C[p]$  with  $r_a$  for the 4s state.

了囚禁在真空球形微腔中氢原子的 2s 态  $C[r]$  和  $C[p]$  随囚禁半径  $r_a$  的变化情况. 发现与 InN 电介质球形微腔相比,  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化情况相似, 只是极值点的位置不同. InN 电介质球形微腔的  $C[r]-r_a$  和  $C[p]-r_a$  曲线的极值点都向更大的半径移动. 这些结果表明, 微腔中填充的电介质材料改变了氢原子内部的无序性.

图 5 为囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的 3s 态和 4s 态的香农信息熵和形状复杂度随半径的变化关系. 图 5(a) 和 (c) 为 3s 态和 4s 态的  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  和  $\ln \langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化曲线, 这些曲线的形状与图 4(a) 所示的情况非常相似. 图 5(b) 为 3s 态的位置空间和动量空间中的形状复杂度  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化情况, 与 2s 态的  $C[r]$  和  $C[p]$  曲线不同, 3s 态的  $C[r]-r_a$  曲线中只有一个最大值, 出现在  $r_a = 88.12$  处.  $C[p]$  在达到定值之前, 随着  $r_a$  的增大单调增加, 说明平均电子概率密度  $\ln \langle p \rangle$  对形状复杂度  $C[p]$  的相对贡献大于熵  $S_p$ . 图 5(d) 为 4s 态的位置空间和动量空间中的形状复杂度

$C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化情况, 此曲线与图 5(b) 中相似, 其中  $C[r]-r_a$  曲线的最大值向右移动到  $r_a$  为 99.86 处, 曲线波峰变宽.

接下来, 还探讨了量子囚禁对 InN 电介质球形微腔中氢原子 2p, 3p 和 4p 态香农信息熵和形状复杂度的影响. 表 3 列出了在不同半径的微腔中, 2p, 3p 和 4p 态的香农信息熵和形状复杂度的计算结果.

图 6 给出了囚禁对 InN 电介质球形微腔氢原子的 2p, 3p 和 4p 态的香农信息熵的以及形状复杂度随半径的变化. 左边一列给出的是 2p, 3p 态和 4p 态对应的  $S_r$ ,  $S_p$  和  $\ln \langle r \rangle$ ,  $\ln \langle p \rangle$  随半径的变化, 如图 6(a), (c), (e) 所示. 可以看出, 这些曲线的形状与 s 态的相似, 当半径较小时,  $S_r$  和  $\ln \langle p \rangle$  随半径的增大而增大, 而  $S_p$  和  $\ln \langle r \rangle$  随半径的增大而减小; 当半径较大时,  $S_r$ ,  $S_p$  和  $\ln \langle r \rangle$ ,  $\ln \langle p \rangle$  趋近于一个恒定值. 右边一列给出的是 2p, 3p 态和 4p 态对应的形状复杂度  $C[r]$  和  $C[p]$  随半径的变化. 图 6(b) 给出了 2p 态的  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化曲

表 3 InN 电介质球形微腔中氢原子 2p, 3p 和 4p 态位置空间和动量空间中的香农信息熵和形状复杂度  
Table 3. Shannon information entropy and shape complexity of 2p, 3p and 4p states in the position space and momentum space for hydrogen atom confined in the InN dielectric spherical microcavity.

$r_a/\text{a.u.}$	0.5	2	4	6	10	40	100	400	1000	1500
2p	$S_r$	-1.1279	3.0287	5.1050	6.3181	7.8439	11.9414	14.4765	15.8804	15.8804
	$S_p$	9.0214	4.8633	2.7851	1.5697	0.0398	-4.0817	-6.5889	-7.7092	-7.7092
	$C[r]$	1.1568	1.1577	1.1589	1.1602	1.1628	1.1887	1.2918	1.7107	1.7107
	$C[p]$	1.3084	1.3068	1.3049	1.3024	1.2982	1.2749	1.3281	1.7639	1.7639
3p	$S_r$	-1.3920	2.7660	4.8442	6.0595	7.5896	11.7333	14.4737	18.2711	18.4214
	$S_p$	10.3320	6.1733	4.0942	2.8783	1.3468	-2.7953	-5.4546	-9.4770	-9.6406
	$C[r]$	1.6088	1.6113	1.6148	1.6183	1.6254	1.6833	1.8150	1.8267	1.9657
	$C[p]$	1.2564	1.2547	1.2526	1.2506	1.2465	1.2240	1.2749	2.9511	2.9671
4p	$S_r$	-1.5141	2.6444	4.7234	5.9394	7.4711	11.6261	14.3794	18.7629	20.1488
	$S_p$	11.1181	6.9596	4.8808	3.6652	2.1344	-2.0027	-4.6540	-8.7725	10.8158
	$C[r]$	2.0644	2.0676	2.0719	2.0762	2.0850	2.1533	2.2977	2.2520	2.0817
	$C[p]$	1.2878	1.2862	1.2845	1.2827	1.2791	1.2542	1.2288	2.7123	3.8746

线. 可以看出, 在相同的半径下,  $C[p]$  的值总是大于  $C[r]$  的值. 在较小的半径下, 两种曲线的形状有一定的差异. 但随着半径的增大,  $C[p]$ - $r_a$  曲线的形状与  $C[r]$ - $r_a$  曲线相似, 均随半径  $r_a$  单调增大. 当半径非常大时,  $C[r]$  和  $C[p]$  的值都接近于一个常数. 图 6(d) 显示了 3p 态的  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化. 当  $r_a < 170.426$  时,  $C[r] > C[p]$ . 随着  $r_a$  的增大, 当  $r_a > 170.426$  时,  $C[r] < C[p]$ . 图 6(e) 显示了 4p 态  $C[r]$  和  $C[p]$  随半径  $r_a$  的变化. 当  $r_a < 340.234$  时,  $C[r] > C[p]$ . 随着  $r_a$  的增大,  $C[r] < C[p]$ .

最后, 还对囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子不同量子态的香农信息熵 ( $S_t$ ) 和形状复杂度进行了比较. 图 7 给出了不同量子态的香农信息熵和  $S_t$  随微腔半径的变化曲线. 结果表明, 在相同的半径下, 1s 态的  $S_t$  最小. 原因如下: 在  $r_a$  一定的情况下, 1s 态能量最小. 根据量子统计原理, 熵是一个系统无序性的度量. 系统越有序, 它的熵越小; 相反, 系统越无序, 熵越大. 与 1s 态相对应的囚禁氢原子的能量最小. 能量越低, 系统越稳定, 因此 1s 态  $S_t$  最小.

此外, 激发态的  $S_t$  的排列顺序随微腔半径的变化而变化. 例如, 当  $r_a < 129.269$  时,  $S_t$  的排列顺序是:  $S_t^{1s} < S_t^{2p} < S_t^{2s} < S_t^{3p} < S_t^{3s} < S_t^{4p} < S_t^{4s}$ . 当  $r_a = 129.269$  时, 香农信息熵和中出现简并现象  $S_t^{2p} = S_t^{2s}$ . 随着半径  $r_a$  的增大,  $129.269 < r_a < 247.992$ ,  $S_t$  的排列顺序调整变成:  $S_t^{1s} < S_t^{2s} <$

$S_t^{2p} < S_t^{3p} < S_t^{3s} < S_t^{4p} < S_t^{4s}$ . 由于  $S_t$  是衡量系统位置-动量关联性的一个重要参数, 研究结果表明可以通过改变  $r_a$  来调控这种关联性效应.

图 8 比较了囚禁在 InN 电介质球形微腔内的氢原子的不同量子态的位置空间的形状复杂度  $C[r]$  随半径  $r_a$  的变化. 由图中可以很清楚地看出, 当  $r_a$  很小时,  $r_a < 32.689$ , 微腔的量子囚禁对形状复杂度  $C[r]$  的影响非常明显, 对于不同的量子态,  $C[r]$  不存在简并,  $C[r]$  的排列顺序为:  $C[r]^{2p} < C[r]^{1s} < C[r]^{3p} < C[r]^{4p} < C[r]^{2s} < C[r]^{3s} < C[r]^{4s}$ . 当  $r_a = 32.689$  时,  $C[r]$  出现简并,  $C[r]^{3p} = C[r]^{1s}$ . 当  $32.689 < r_a < 67.794$  时,  $C[r]^{2p} < C[r]^{3p} < C[r]^{1s} < C[r]^{4p} < C[r]^{2s} < C[r]^{3s} < C[r]^{4s}$ . 当  $67.794 < r_a < 169.654$  时, 顺序变成:  $C[r]^{2p} < C[r]^{3p} < C[r]^{4p} < C[r]^{1s} < C[r]^{2s} < C[r]^{3s} < C[r]^{4s}$ . 当  $r_a = 311.401$  时,  $C[r]^{2s} = C[r]^{1s}$ . 此外, 当  $r_a$  很大时, 量子囚禁对  $C[r]$  的影响减弱, 不同量子态的  $C[r]$  趋近均于恒定值. 由图 8 可以看出, s 态的位置空间形状复杂度的恒定值都很相近,  $C[r]^{1s} \approx C[r]^{2s} \approx C[r]^{3s} \approx C[r]^{4s}$ .

图 9 为不同量子态的动量空间的形状复杂度  $C[p]$  随半径  $r_a$  的变化曲线. 同样发现  $C[p]$  的排列顺序与  $r_a$  的大小密切的关系. 当  $r_a$  很小时,  $C[p]$  在不同状态下的简并现象很明显. 例如, 当  $r_a < 12.281$  时, 存在  $C[p]^{4p} \approx C[p]^{4s} \approx C[p]^{3p} \approx C[p]^{3s} \approx C[p]^{2p} \approx C[p]^{2s}$ . 当  $110.418 < r_a < 230.751$  时, 仅有

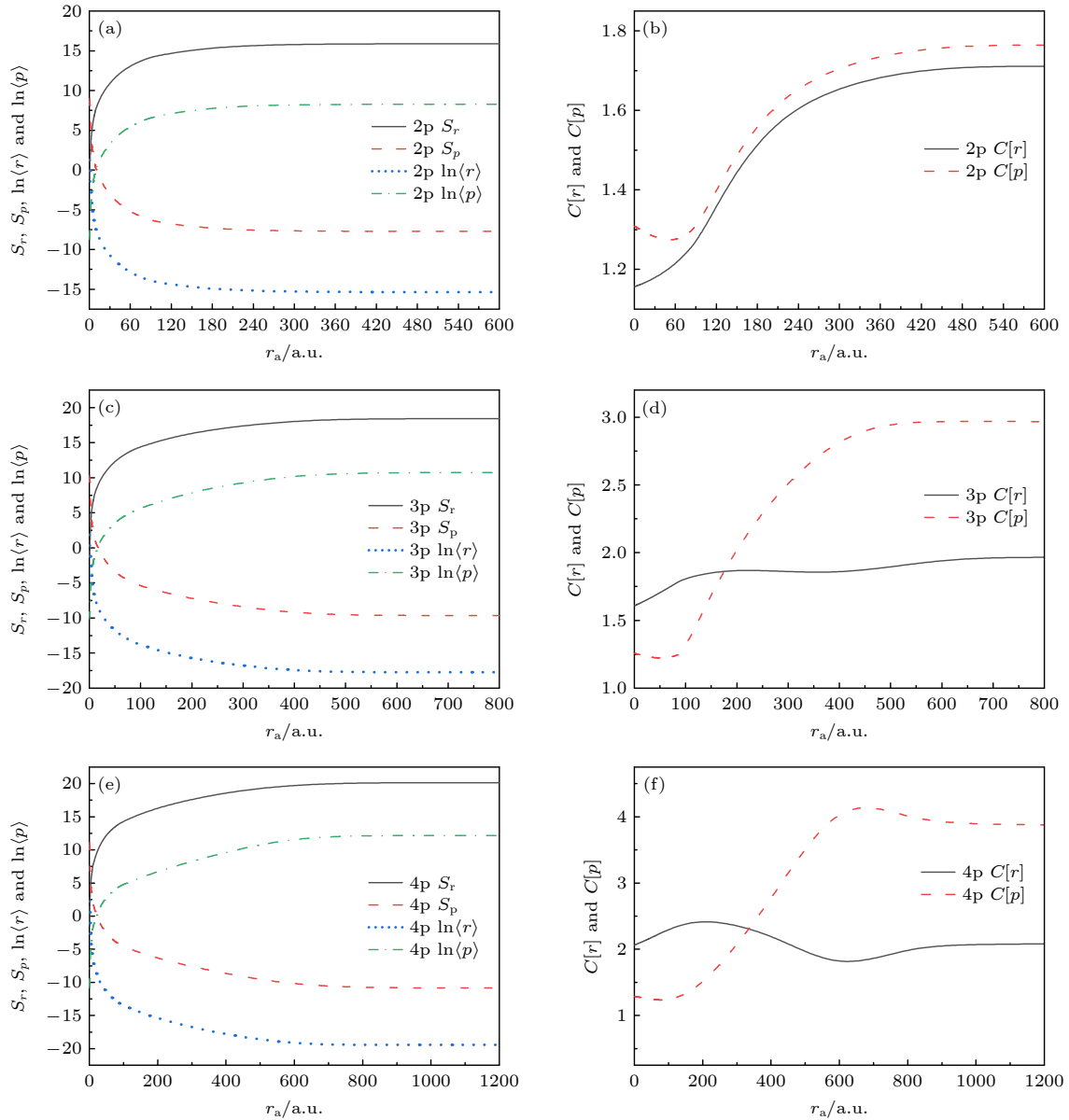


图 6 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的 2p, 3p 和 4p 态的香农信息熵和形状复杂度随微腔半径的变化 (a) 2p 态  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  和  $\ln \langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化; (b) 2p 态  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化; (c) 3p 态  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  和  $\ln \langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化; (d) 3p 态  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化; (e) 4p 态  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  和  $\ln \langle p \rangle$  随  $r_a$  的变化; (f) 4p 态  $C[r]$  和  $C[p]$  随  $r_a$  的变化

Fig. 6. Shannon information entropy and shape complexity as a function of the radius of the InN dielectric spherical microcavity for the 2p, 3p and 4p states: (a) Variation of  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  and  $\ln \langle p \rangle$  with  $r_a$  for the 2p state; (b) variation of  $C[r]$  and  $C[p]$  with  $r_a$  for the 2p state; (c) variation of  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  and  $\ln \langle p \rangle$  with  $r_a$  for the 3p state; (d) variation of  $C[r]$  and  $C[p]$  with  $r_a$  for the 3p state; (e) variation of  $S_r$ ,  $S_p$ ,  $\ln \langle r \rangle$  and  $\ln \langle p \rangle$  with  $r_a$  for the 4p state; (f) variation of  $C[r]$  and  $C[p]$  with  $r_a$  for the 4p state.

$C[p]^{4s} \approx C[p]^{3p}$ . 当  $r_a$  足够大时,  $C[p]$  中的简并完全消失, 顺序为  $C[p]^{2p} < C[p]^{1s} < C[p]^{3p} < C[p]^{2s} < C[p]^{4p} < C[p]^{3s} < C[p]^{4s}$ .

通过对图 8 和图 9 进行分析发现, 可以通过改变微腔的囚禁半径, 来调节位置空间和动量空间的形状复杂度, 进而对囚禁量子系统的内部无序性进行调控.

## 4 结 论

综上所述, 利用香农信息熵和形状复杂度研究了 InN 电介质球形微腔内氢原子的内部无序性, 探讨了量子囚禁对类氢原子内部无序性的影响. 研究表明: 当球形微腔半径较小时, 量子囚禁效应显著, 囚禁在 InN 电介质球形微腔内氢原子的

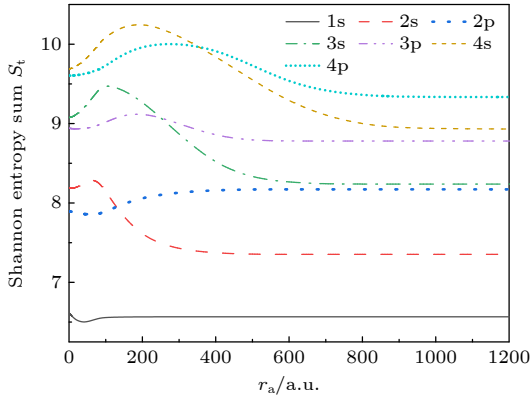


图 7 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的不同量子态的香农信息熵和  $S_t$  的比较

Fig. 7. Comparison of Shannon information entropy sum  $S_t$  for different quantum states of hydrogenic atom confined in the InN dielectric spherical microcavity.

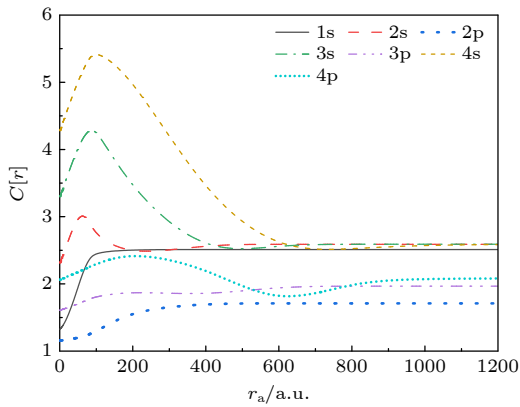


图 8 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的不同的 s 态和 p 态的动量空间的形状复杂度  $C[r]$  的比较

Fig. 8. Comparison of the momentum space shape complexity  $C[r]$  for different s and p states of hydrogenic atom confined in the InN dielectric spherical microcavity.

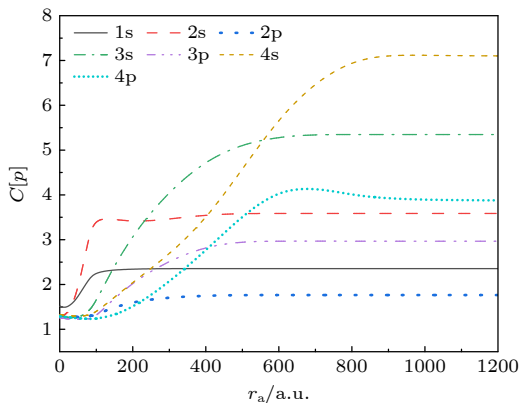


图 9 囚禁在 InN 电介质球形微腔中氢原子的不同的 s 态和 p 态的动量空间的形状复杂度  $C[p]$  的比较

Fig. 9. Comparison of the momentum space shape complexity  $C[p]$  for different s and p states of hydrogenic atom confined in the InN dielectric spherical microcavity.

香农信息熵和形状复杂度与真空球形微腔内氢原子的差异非常明显;然而,当球形微腔半径较大时,量子囚禁效应减弱,二者的差异可以忽略.这一结果表明,可以通过改变微腔半径和微腔内材料的电介质常数,对囚禁原子的内部无序性进行调控.通过对囚禁氢原子不同量子态的香农信息熵和形状复杂度进行比较,发现香农信息熵和形状复杂度具有一定的简并性,这与自由氢原子的情况不同.量子系统的电子密度均匀并不一定意味着有序.一个电子密度均匀的系统可以是有序的,也可以是无序的,这取决于很多因素.例如,描述自由电子的平面波,因为其具有固定的波长、频率和动量,且在空间中各点出现的几率相等,所以这个体系可以看作是有序的.然而,对于自由氢原子,即使电子密度是均匀的,也并不能说明这个系统是有序的.对应不同的量子态,其在位置空间的信息熵不为 0,因此这个体系仍然是无序的.系统的内部无序与量子态密度的非均匀性密切相关,且可以通过香农信息熵和形状复杂度来测量,因此为囚禁量子系统的无序性的调制提供了一种有效的方法.本研究也对囚禁原子的量子信息测量具有一定的指导意义,在半导体物理、化学物理和凝聚态物理等领域具有一定的实际应用价值.

### 参考文献

- [1] Connerade J P, Dolmatov V H, Lakshmi P A 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 251
- [2] Sabin J R, Brändas E J, Cruz S A 2009 *The Theory of Confined Quantum Systems, Parts I and II, Advances in Quantum Chemistry* (Vols. 57, 58) (Amsterdam: Academic Press) pp2–19
- [3] Sen K D 2014 *Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules* (Switzerland: Springer) pp1–253
- [4] Wang D H, Zhang J, Sun Z P, Zhang S F, Zhao G 2021 *Chem. Phys.* **551** 111331
- [5] Martínez-Sánchez M A, Vargas R, Garza J 2019 *Quantum Rep.* **1** 208
- [6] Guerra D, Vargas R, Fuentealba P, Garza J 2009 *Adv. Quantum Chem.* **58** 1
- [7] Rodríguez-Bautista M, Díaz-García C, Navarrete-López A M, Vargas R, Garza J 2015 *J. Chem. Phys.* **143** 034103
- [8] Porras-Montenegro N, Pérez-Merchancano S T 1992 *Phys. Rev. B* **46** 9780
- [9] Şahin M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 045317
- [10] Yuan J H, Zhang Y, Guo X X, Zhang J J, Mo H 2015 *Physica E* **68** 232
- [11] Wang D H, He X, Liu X, Chu B H, Liu W, Jiao M M 2022 *Philos. Mag.* **102** 2302
- [12] Longo G M, Longo S, Giordano D 2015 *Phys. Scr.* **90** 085402
- [13] Cottrell T L 1951 *Trans. Faraday Soc.* **47** 337

- [14] Zhu J L, Xiong J J, Gu B L 1990 *Phys. Rev. B* **41** 6001
- [15] Lopez-Rosa S, Manzano D, Dehesa J S 2009 *Physica A* **388** 3273
- [16] Liu S 2007 *J. Chem. Phys.* **126** 191107
- [17] Aquino N, Flores-Riveros A, Rivas-Silva J F 2013 *Phys. Lett. A* **377** 2062
- [18] Sun G H, Popov D, Camacho-Nieto O, Dong S H 2015 *Chin. Phys. B* **24** 100303
- [19] Najafzade S A, Hassanabadi H, Zarrinkamar S 2016 *Chin. Phys. B* **25** 040301
- [20] Bialynicki-Birula I, Mycielski J 1975 *Comm. Math. Phys.* **44** 129
- [21] Guevara N L, Sagar R P, Esquivel R O, 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 7030
- [22] Fuentealba P, Melin J 2002 *Int. J. Quantum Chem.* **90** 334
- [23] López-Ruiz R, Mancini H L, Calbet X 1995 *Phys. Lett. A* **209** 321
- [24] Calbet X, López-Ruiz R 2001 *Phys. Rev. E* **63** 066116
- [25] Angulo J C, Antolín J 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 164109
- [26] Majumdar S, Mukherjee N, Roy A K 2017 *Chem. Phys. Lett.* **687** 322
- [27] Liang S, Lv Y W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1617 (in Chinese) [梁双, 吕燕伍 2007 物理学报 **56** 1617]
- [28] Mata M, Zhou X, Furtmayr F, et al. 2013 *J. Mater. Chem. C* **1** 4300
- [29] Guo Y, Pan F, Ren Y J, et al. 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 24239
- [30] Li P, David A, Li H, et al. 2021 *Appl. Phys. Lett.* **119** 231101
- [31] Binks D J, Dawson P, Oliver R A, Wallis D J 2022 *Appl. Phys. Rev.* **9** 041309
- [32] Chang C, Li X C 2022 *Eur. Phys. J. D.* **76** 134
- [33] González-Férez R, Dehesa J S, Patil S H, Sen K D 2009 *Physica A* **388** 4919

# Internal disorder of hydrogenic-like atom trapped in dielectric spherical microcavity\*

Liu Xue Wang De-Hua<sup>†</sup>

(School of Physics and Optoelectronic Engineering, Ludong University, Yantai 264025, China)

( Received 20 December 2022; revised manuscript received 21 March 2023 )

## Abstract

The research on the disorder of quantum system plays a very important role in the field of quantum information, and has received much attention from theoretical and experimental researchers. However, it is very difficult to study the disorder of atoms trapped in microcavity due to their complex nonlocal space-time evolution characteristics. To solve this problem, we present a method to study the internal disorder of hydrogenic atoms trapped in microcavity, that is, to characterize and investigate the disorder of the confined system by using the quantum information entropy and shape complexity of the system. The Shannon information entropy and shape complexity in position space and momentum space ( $S_r$ ,  $S_p$ ,  $C[r]$ ,  $C[p]$ ) are calculated and analyzed for different quantum states of hydrogenic atom in InN dielectric spherical microcavity, and pay special attention to the exploration of the influence of quantum confinement effect on the disorder of the system. The results show that when the radius of the spherical microcavity is very small, the quantum confinement effect is more significant, and a series of extreme points appears in the shape complexity curve of the system, which is caused by the joint interaction of information entropy and spatial inhomogeneity. With the increase of the radius of the spherical cavity, the effect of quantum confinement is weakened, and the Shannon information entropy and shape complexity of the confined hydrogenic atom are similar to the counterparts of the hydrogenic atom in free space. Our work provides an effective method to study the internal disorder of a confined quantum. This work provides an effective method for studying the internal disorder of confined quantum systems and presents some references for the information measurement of confined quantum systems.

**Keywords:** Shannon information entropy, shape complexity, quantum confinement, InN dielectric spherical microcavity

**PACS:** 03.65.Ge, 03.67.-a, 12.38.Aw, 77.84.-s

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222413

\* Supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11374133) and the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2019MA066).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [lduwdh@163.com](mailto:lduwdh@163.com)



囚禁在电介质球形微腔中类氢原子的内部无序性

刘雪 王德华

**Internal disorder of hydrogenic-like atom trapped in dielectric spherical microcavity**

Liu Xue Wang De-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 100301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222413

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222413>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

中间测量对受驱单量子比特统计复杂度的影响

Influence of intermediated measurements on quantum statistical complexity of single driven qubit

物理学报. 2020, 69(23): 230301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200802>

电介质微球和金属平面纳米层增强荧光远场定向发射

Far-field directional emission of fluorescence enhanced by dielectric microsphere and metallic planar nanolayers

物理学报. 2022, 71(17): 176801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220605>

功能化原子力显微镜在纳米电介质材料性能研究中的应用进展

Progress of application of functional atomic force microscopy in study of nanodielectric material properties

物理学报. 2022, 71(24): 240701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221462>

含双挡板金属-电介质-金属波导耦合方形腔的独立调谐双重Fano共振特性

Resonance characteristics of independently tuned dual Fano of metal-dielectric-metal waveguide coupling square cavity with double baffles

物理学报. 2019, 68(10): 107302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181985>

开放式法布里-珀罗光学微腔中光与单量子系统的相互作用

Interaction between light and single quantum-emitter in open Fabry-Perot microcavity

物理学报. 2022, 71(6): 060201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211970>

一种新型光学微腔的理论分析

Theoretical analysis of new optical microcavity

物理学报. 2018, 67(14): 144201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180067>