

GaAs 量子点中电子结构和幻角动量的对称性分析*

黄钢明¹, 刘益民²

(1. 中山大学物理科学与工程技术学院, 广东 广州 510275;
2. 韶关学院物理学系, 广东 韶关 512005)

摘要: 用有效质量近似理论和哈密顿量 H 对角化方法计算了在抛物势中, GaAs 量子点中有 10 个极化电子时的本征能量和本征波函数, 并从本征波函数中提取的一体、二体密度函数方法得到了电子结构的直观图像。用对称性分析了量子点中幻角动量和电子结构。

关键词: 量子点; 幻角动量; 电子结构; 对称性

中图分类号: O413.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579(2009)06-0033-05

Symmetry Constraints of the Magic Angular Momentums and the Electronic Structures of GaAs Quantum Dot

HUANG Gangming¹, LIU Yimin²

(1. School Physics & Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China;
2. Department of Physics, Shaoguan University, Shaoguan 512005, China)

Abstract: With the effective-mass approximation and the method of diagonalized the Hamiltonian, the eigenvalue of energy and the eigen-wave-function of GaAs quantum dots in the polarized 10 electrons has been calculated in the parabolic potential energy, and the clear electronic structures has been gained by the methods one-body and two-body density functions. The electronic structures and the magic angular momentums in the quantum dots are analyzed with the symmetry constraints.

Key words: quantum dots; magic angular momentum; electronic structures; symmetry constraints

随着微观制备技术的发展和进步^[1], 目前可以得到各种类型和大小的量子结构材料, 其特点是可以根据人们对材料性质的要求, 通过人为地控制其外加电磁场、参杂和尺寸大小等因素, 制造各种类型的材料和微观器件, 因此这些材料在高科技中有着广泛的应用前景^[2]。由于量子效应在材料中起着非常重要的支配作用, 系统中可能出现一些新的物理现象和规律, 因而在理论上有着重要的研究价值^[3]。

量子点是重要的量子结构材料, 因此国内外学者在理论上用多种方法对其结构特征和性质进行了

深入地研究, 如 Hartree-Fock 方法, 对角化方法和解析平面波展开的方法等^[4-6]。而量子点中电子结构是它的基本性质之一^[7], 它的其他性质(如尺寸大小, 能级和光学性质等)都与其有关。量子点中电子为核+环结构已经被一些研究所证实^[8-9], 其结构不仅受外加电磁场的影响^[10], 而且与参杂因素有关^[11-12]。但是, 当量子点中电子数在 $5 \leq N \leq 50$ 范围中时, 人们在理论上对其结构研究较少。另外量子点中电子结构和能量特征与对称性限制的关系缺乏较深入地讨论。

本文将用有效质量近似和少体物理中对角化方

* 收稿日期: 2009-04-16

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10847167, 10874122); 广东省自然科学基金资助项目(8451027501001445, 7007806)

作者简介: 黄钢明(1958年生), 男, 博士, 副教授; E-mail: stshgm@mail.sysu.edu.cn

法讨论在抛物势中^[13], GaAs 量子点有 10 个极化电子时, 首态 (即角动量量子数 L 相同的一系列态中, 能量最低的态) 的库仑相互作用能和电子结构的特性。用密度函数分析方法得到直观的电子结构图像, 并讨论角动量和电子结构受对称性影响的规律。揭示了对称性是影响电子结构和库仑相互能特征的重要因素。

1 Hamilton 量和计算方法

在二维平面 (设为 $x-y$ 平面) 上有一个包含 N 极化个电子的量子点, 设在量子点中有频率为 ω_0 的一个轴对称的抛物势。系统的 Hamilton 量为

$$H = T + U, \quad T = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_j^2 \quad (1a)$$

$$U = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r_j^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \sum_{j<k}^N \frac{1}{r_{jk}} \quad (1b)$$

式中 T 和 U 分别是动能和势能。根据有效质量近似, 量子点中电子的有效质量为 m^* (在 GaAs 量子点中 $m^* = 0.067 m_e$), ϵ_0 是真空中介电常数, ϵ_r 是介质中的相对介电常数 (在 GaAs 量子点中 $\epsilon_r = 12.4$), $\hbar\omega_0 = 3 \text{ meV}$ 。

为了对角化 Hamilton 量, 考虑一个质量为 m^* 的不带电粒子, 处在 Ω 的谐振子势场中, 其 Hamilton 量为

$$h = - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{1}{2} m^* \Omega^2 r^2 \quad (2)$$

这里 Ω 是一个变分的参数, 一般是不等于 ω_0 的。 h 的本征函数用 ψ_i (量子数 $i = m, k, \mu$) 表示, 其中空间波函数为 φ_{mk} , 自旋波函数为 χ_μ (自旋量子数 $\mu = \pm \frac{1}{2}$), 故有 $\psi_i = \varphi_{mk}\chi_\mu$, 这些 ψ_i 可以作为单粒子基矢, 其中 m 和 k 分别是正转声子数和逆转声子数, 它们分别可取 $0, 1, 2, \dots$ 。空间波函数的表达式为

$$\varphi_{mk}(\xi, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\sum_{j=0}^n d_j^{mk} \xi^{2(n-j)} \right) \xi^{|m-k|} e^{-\frac{1}{2}\xi^2 + i(m-k)\varphi} \quad (3)$$

其中: $\xi = \sqrt{\frac{m^* \Omega}{\hbar}} r$,

$$d_j^{mk} = (-)^j \frac{\sqrt{m!k!}}{j!(m-j)!(k-j)!},$$

$n = \text{Min}(m, k)$, φ 是 r 的方位角。这些单粒子基矢是正交归一的。

而多粒子 (N) 基矢波函数为单粒子基矢波函数的乘积形式, 由于系统讨论的是费米子 (电

子), 所以要将乘积基矢反对称化。但是在电子极化的状态下, 只需要空间波函数反对称化就可以了, 因而有 N 个电子空间基矢波函数为

$$\Phi_\alpha(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{m_1 k_1}(r_1) & \varphi_{m_1 k_1}(r_2) & \dots & \varphi_{m_1 k_1}(r_N) \\ \varphi_{m_2 k_2}(r_1) & \varphi_{m_2 k_2}(r_2) & \dots & \varphi_{m_2 k_2}(r_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{m_N k_N}(r_1) & \varphi_{m_N k_N}(r_2) & \dots & \varphi_{m_N k_N}(r_N) \end{vmatrix} \quad (4)$$

得到多粒子的基矢后, 就可以将对角动量为 L 的本征矢用多粒子基矢展开得

$$\Psi_L = \sum C_\alpha \Phi_\alpha \quad (5)$$

这里 C_α 是展开系数, 因为这个系统中的角动量是一个守恒量, 所以这些基矢波函数要受到 $\sum_i (m_i - k_i) = L$ 的限制。

有了 Hamilton 量和多粒子基矢后, 就可以进行对角化。对角化是求在角动量 (角动量 L 是好量子数) 一定的条件下, Hamilton 量的本征波函数和本征能量。在计算过程中不能取无限个乘积基矢, 所以要采用一定的方法保证在我们的计算条件下, 满足收敛的要求, 即在众多的基矢中选择有效的基矢, 具体的方法是限制每个单粒子基矢的正转声子数 m_i 和逆转声子数 k_i 的大小, 即令 $m_i \leq m_{\max}$ 和 $k_i \leq k_{\max}$, 并且要求 $\sum_i (m_i - k_i) = L$ 。即使如此基矢的数目任然很多, 为进一步减少基的个数, 采取如下措施: 在基矢的选择中, 选择对基态和低激发态贡献大的基矢, 而忽略了贡献较小的基矢, 即先计算 Hamilton 矩阵对角线上的元 $H_{\alpha\alpha} = [\Phi_\alpha | H | \Phi_\alpha]$, 然后从小到大排序, 即, $[\Phi_\alpha | H | \Phi_\alpha] \leq [\Phi_{\alpha+1} | H | \Phi_{\alpha+1}]$ 。最后只选取前面 J 个最小的矩阵元 $H_{\alpha\alpha}$ 所对应的 Φ_α 作为对角化 Hamilton 的基矢。为了检验以上方法的可靠性, 只要将 J 加大到某个 J' ($J' > J$), 然后比较本征能量的变化, 使其达到计算要求。

通过对角化得到态的本征能量和本征波函数。但本征波函数是很复杂的, 为了得到电子之间关联的细节和直观的电子结构图像, 从本征波函数中提取了密度函数^[8], 它们定义如下:

一体密度函数定义为

$$\rho_1(r_1) = \int |\Psi_L|^2 dr_2 dr_3 \dots dr_N \quad (6)$$

二体密度函数是将一个电子固定在 r_1 处, 定义为

$$\rho_2(r_1, r_2) = \int |\Psi_L|^2 d r_3 d r_4 \cdots d r_N, \quad (7)$$

在下面电子结构分析中将用以上密度函数。

2 计算结果

在本文中计算了 GaAs 量子点中有 10 个极化电子 ($N=10$) 的情况, 在对角化中用了一万个基矢就能够达到分析的要求。在对角化后, 得到态的本征能量和本征波函数, 设 $E((L)_i)$ 表示 $(L)_i$ 态的本征能量, 而首态用 $(L)_1$ 表示。先来讨论系统中电子之间的库仑间相互作用, 对于系统的首态, 如果除去电子之间的库仑相互作用, 所有的电子将落到最低朗道能级上, 因此系统的本征能量就等于 $(L+N)\hbar\omega_0$, 因此定义 $\varepsilon(L) \equiv E((L)_1) - (L+N)\hbar\omega_0$ ^[13], 表示首态电子之间库仑排斥力的大小 (如图 1)。分析可知当角动量 L 增大时, 相应的量子点尺寸增加, 这样库仑排斥力将减少, 因此, $\varepsilon(L)$ 将随 L 增加是一个单调下降。但在图 1 看到量子点中角动量 L 从 45 到 80 范围中有几个特殊拐点出现, 这些拐点对应的角动量称之为幻角动量。这些幻角动量形成的原因将在后面分析中得到解释。

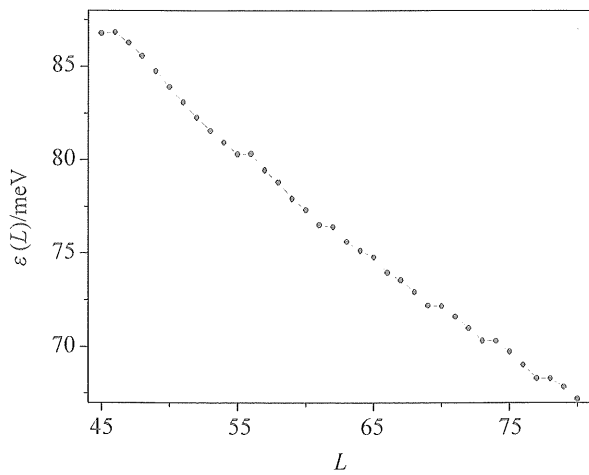


图 1 $\varepsilon(L)/\text{meV}$ 随 L 的变化

Fig. 1 $\varepsilon(L)/\text{meV}$ as a function of L

得到的本征波函数是很复杂的, 为了讨论量子点中的电子结构, 先用 (6) 式得到对应角动量首态的一体密度 $\rho(r)$, 从 $\rho(r)$ 中可以看到它们有三种结构。第一种是近乎为均匀的分布如图 2 (a)、(b) 所示 (图中 r 的单位为 $\sqrt{\hbar/(m^*\omega)}$); 第二种为中空的结构, 如图 2 (c)、(d); 最后一种如图 2 (e)、(f) 所示, 这种结构在 $\rho(r)$ 中有

一个明显的极小值, 故为核 + 环结构。但从图 2 中不能清楚看到电子分布的几何结构。

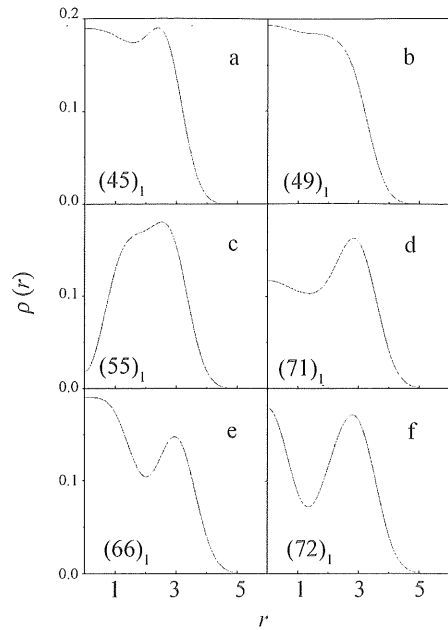


图 2 首态一体密度 $\rho(r)$ 随 r 的变化。

Fig. 2 $\rho(r)$ of the first states as a function of r .

为了进一步讨论量子点中电子结构的分布, 用 (7) 式得到的二体密度 $\rho(r_1, r_2)$, 如图 3 所示。图中 r_1 固定在 x 轴上的黑点处, 图中较暗的位置表示密度 $\rho(r_1, r_2)$ 较大。长度单位为 $\sqrt{\hbar/(m^*\omega)}$ 。从 $\rho(r_1, r_2)$ 可以清楚地看到电子结构分为七类。第一类是角动量 $L=72$ (如图 3 (a) 所示) 的 1—9 结构, 即核内有一个电子, 环中有 9 个电子形成一个正九边形几何结构; 第二类为 2—8 结构, 对应的角动量 $L=71$ 如图 3 (b); 而三、四、五类分别为 3—7、4—6、5—5 结构, 如图 3 (c)、(d)、(e) 所示, 对应的角动量分别为 $L=66, 51, 50$ 。以上结构中可以看到清晰的几何结构图像, 所以称之为类晶结构。

第六类为涡旋态结构 ($L=55$), 结构中心电子密度很小, 这点在图 2 (c) 和图 3 (f) 中看的很清楚。

而最后一类是电子在核内和环内没有清晰的几何结构, 称之为类液结构, 如图 3 (g) 表示这种结构一个态 ($L=49$) 的情况。

3 对称性分析

下面将分析量子点中库仑相互作用能和电子结构的特点。由于量子点中电子数较多 ($N=10$) 和

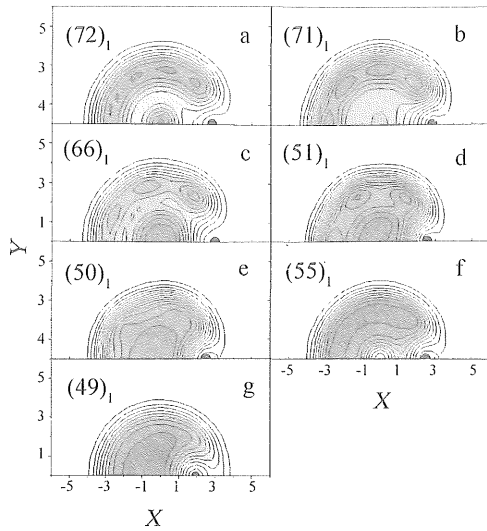


图 3 首态二体密度 $\rho(r_1, r_2)$ 随 r_2 变化。

Fig. 3 $\rho(r_1, r_2)$ of the first states as a function of r_2 .

电子之间的相互排斥作用, 为了有利形成束缚, 空间波函数一般主要分布在总势能较低的区域, 在系统中, 2—8 和 3—7 结构势能较为有利。因此在本文讨论的角动量范围内这两类结构较多。但为什么不是所有的电子结构都是上面两种情况呢? 这里面除动力学和系统的势能的因素外, 应该还有其他因素的影响。

文献 [13] 用对称性分析得到电子结构和 $\varepsilon(L)$ 特征, 在本文中任然用这方法对目前系统电子结构和 $\varepsilon(L)$ 进行讨论。用 N_{in} 、 l_{in} 和 N_{out} 、 l_{out} 分别表示核内和环内电子数和角动量。

对第一类角动量 $L = 72$ 时, 为 1—9 结构, 从图 3 (a) 中可以看到 $N_{in} = 1$, 因系统能量较低, 所以核内电子没有激发, 故对应 l_{in} 为 0, 而环内的角动量 l_{out} 为 72, 虽然这种结构的系统势能较高, 但满足 $l_{out} = 9j$ (j 为整数) 对称性的要求, 所以有这种结构出现; 第二类 $L = 71$ 时, 为 2—8 结构, $N_{in} = 2$, 从图 2 (d) 中得知核内有激发情况故有 l_{in} 为 3, l_{out} 应为 68, 满足 $l_{out} = 8j + 4$; 第三类 $L = 66$ 为 3—7 结构, $N_{in} = 3$, 没有核激发有 l_{in} 为 3, 环 l_{out} 为 63, 满足 $l_{out} = 7j$ 对称性要求; 第四类 $L = 51$, 4—6 结构, 由于能量较低没有核内电子激发 l_{in} 为 6, $l_{out} = 45$ 满足 $l_{out} = 6j + 3$; 第五类 $L = 50$, 5—5 结构, l_{in} 为 10 (没有核激发), 而 l_{out} 为 40, 满足 $l_{out} = 5j$, 虽然第四、五类结构的势能较高, 由于对称性的限制, 它也不能形成势能较低的 2—8 和 3—7 结构。

第六类 $L = 55$, 涡旋态结构 (图 3 (f)), 这种是一个特殊态, 在极化时量子点中, 当总角动量

$L = qN(N-1)/2 + N$ (N 是电子的数目 q 是一个奇整数) 时, 量子点中电子 e_1, e_2, \dots, e_{10} , 对应的角动量分别是 $l_1 = 1, l_2 = 2, \dots, l_{10} = 10$, 故有涡旋态结构 (中心的电子密度很小); 最后一种是由于不满足对称性要求, 所以没有清晰的几何结构, 如 $L = 49$, 图 3 (g) 所示。

下面分析图 1 中得到 $\varepsilon(L)$ 有一些特殊拐点 (幻角动量), 在图 1 中看到当 $L = 45, 55, 61, 69, 73, 77$ 的几个态 $\varepsilon(L)$ 较低, 这是因为在 $L = 61, 69, 77$ 时为 2—8 结构不仅势能较低, 而且满足对称性的要求的, 而 $L = 62, 70, 78$ 角动量不满足对称性要求的类液结构, 所以有 $\varepsilon(L)$ 平台; 而 $L = 73$ 为 3—7 结构, 这种结构在势能较低和满足对称性要求, 而 $L = 74$, 不满足对称性的要求类液结构, 故 $\varepsilon(L)$ 有一个平台。而对 $L = 45$ 和 55 满足所有结构对称性的要求, 而 $L = 46$ 和 56 因对称性的限制, 故 $\varepsilon(L)$ 较, 所以出现平台。从上面分析可知这些幻角动量是与电子结构和对称性有着密切的关系。

通过计算和分析得到量子点中有极化电子时的电子结构和幻角动量, 分析知道它们不仅动力学和系统的势能有关, 而且对称性对它们有着较大的影响。

参考文献:

- [1] BULJAN M, DESNICA U V, IVANDA M, et al. Formation of three-dimensional quantum dot superlattices in amorphous systems: Experiments and Monte Carlo simulations[J]. Phys. Rev. B, 2009, 79:035310.
- [2] CHAKRABORTY T. Quantum dots [M]. Amsterdam: Elsevier, 1999:3-15.
- [3] KUSHWAHA M S. Plasmons and magnetoplasmons in semiconductor heterostructures [J]. Surf. Sci. Rep., 2001, 41:1-416.
- [4] OSZWALDOWSKI R, ABRAMAVICIUS D, MUKAMEL S. Many-body effects in two-dimensional optical spectra of semiconductor quantum dot pairs; time-dependent Hartree-Fock approximation and beyond[J]. J Phys. Cond. Matter, 2008, 20:045206.
- [5] HUANG G M, LIU Y M, BAO C G. Variation of core-ring structures of quantum dots and the magic angular momenta in the region of intermediate particle number[J]. Phys. Rev. B, 2006, 73:245313.
- [6] 王传道. GaAs/AlxGa1-xAs 球形量子点中的电子结构[J]. 物理学报, 2007, 57: 1091-1096.
WANG Chuandao. Electronic structure in GaAs/AlxGa1-xAs spherical quantum dots[J]. Acta Physics Sinica,

- 2007, 57: 1091 – 1096.
- [7] REIMANN M S, MANNINEN M. Electronic structure of quantum dots[J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2002, 74: 1283 – 1342.
- [8] REIMANN M S, KOSKINEN M, KOLEHMAINEN J, et al. Electronic and magnetic structure of artificial atoms [J]. *Eur. Phys. J. D*, 1999, 9: 105 – 110.
- [9] BAO C G. The symmetry background underlying the ring structures of quantum dots and a classification scheme [J]. *J. Phys. Cond. Matter*, 2002, 14: 8549 – 8561.
- [10] ZHANG X W, XIA J B. Effects of magnetic field on the electronic structure of wurtzite quantum dots: Calculations using effective-mass envelope function theory [J]. *Phys. Rev. B*, 2005, 72: 075363.
- [11] CHUTIA S, BHATTACHARJEE A K. Electronic structure of Mn-doped III-V semiconductor quantum dots [J]. *Phys. Rev. B*, 2008, 78: 195311.
- [12] HUANG G M, LIU Y M, BAO C G. Electronic structures of donor states under a strong magnetic field [J]. *Phys. Rev. B*, 2005, 71: 075302.
- [13] HUANG G M, LIU Y M, BAO C G. Symmetry constraints and the electronic structures of a quantum dot with thirteen electrons [J]. *Phys. Rev. B*, 2003, 68: 165334.

(上接第 32 页)

参考文献:

- [1] YU J S, ONAGDLO S, FIEDLER R. Ovarian cancer identification based on dimensionality reduction for high-throughput mass spectrometry data [J]. *Bioinformatics*, 2005, 21(10): 2200.
- [2] WANG Z F, CHANG Y C. A parsimonious threshold-independent protein feature selection method through the area under receiver operating characteristic curve [J]. *Bioinformatics*, 2007, 23(20): 2788 – 2794.
- [3] BOCKER S, MAKINEN V. Combinatorial approaches for mass spectra recalibration [C]. *IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics*, Jan. -Mar., 2008.
- [4] LI X, SHU L. Kernel-based non-linear dimensionality reduction and classification for genomic microarray [J]. *Expert Systems with Applications*, doi:10.1016, 2008. 9: 70.
- [5] ROBERT T, TREVOR H, BALASUBRAMANIAN N, et al. Sample classification from protein mass spectrometry, by ‘peak probability contrasts’ [J]. *Bioinformatics*, 2004, 20(17): 3034 – 3044.
- [6] TANG H, MUKOMEL Y, FINK E. Diagnosis of ovarian cancer based on mass spectra of blood samples [C]// 2004 IEEE International Conference on Systems, Man and Cybernetics, 2004.
- [7] ALEXE G, ALEXE S, LIOTTA L A, et al. Ovarian cancer detection by logical analysis of proteomic data [J]. *Proteomics*, 2004, 4(3): 766.
- [8] LEVNER I. Feature selection and nearest centroid classification for protein mass spectrometry [J]. *BMC Bioinformatics*, 2005, 6: 68.
- [9] KIRBY M. Geometric data analysis: an empirical approach to dimensionality reduction and the study of patterns [P]. John Wiley & Sons, New York, 2001.
- [10] ROWEIS S T, SAUL L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding [J]. *Science*, 2000, 290: 2323 – 2326.
- [11] LI B, ZHENG C H, HUANG D S. Locally linear discriminant embedding: An efficient method for face recognition [J]. *Pattern Recognition*, 2008, 41: 3813 – 3821.
- [12] LI H, JIANG T, ZHANG K. Efficient and robust feature extraction by maximum margin criterion [J]. *IEEE Trans Neural Networks*, 2006, 17(1): 157 – 165.