

强磁场对中心放置正电荷的 GaAs 量子环能量的影响^{*}

惠 萍

(广东第二师范学院 物理系, 广东 广州 510303)

摘 要: 利用 B 样条技术研究强磁场中 GaAs 量子环的能量和量子尺寸效应。计算结果表明: 强磁场下 ($B > 3\text{T}$), 量子环的基态能量 E_1 和库仑能的绝对值 $|E_c|$ 随着磁场强度 B 的增大而增大。对应不同角动量 ($m = -1, -2, -3$), $E_1 - B$ 曲线的间距被放置在中心的正电荷的库仑场拉宽; 基态能量 E_1 随量子环半径 r_0 的变化曲线出现一个极小值位置 r_{00} , r_{00} 随着 B 的增加而减小。在不同磁场下的 $E_1 - r_0$ 曲线的间距被放置在中心的正电荷的库仑场拉近, 库仑能的绝对值 $|E_c|$ 随着 r_0 的增大而线性减小; 基态能量 E_1 随着谐振子势 $\omega_0\hbar$ 的增大而增大。库仑场使不同角动量 ($m = -1, -2, -3$) 下的 $E_1 - \omega_0\hbar$ 曲线出现交叉现象, 能级次序发生了变化。库仑能的绝对值 $|E_c|$ 随 $\omega_0\hbar$ 的增加而非线性减小。

关键词: B 样条技术; 量子环; 基态能量

中图分类号: O562.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2010) 03-0034-04

The Impact of Strong Magnetic Field on Energies of GaAs Quantum Ring with a Positive Charge Placed in the Center

HUI Ping

(Department of Physics, Guangdong University of Education, Guangzhou 510303, China)

Abstract: The GaAs quantum ring energies and size-dependent effect are studied by B-spline technique in strong magnetic field. The calculated results show: In the strong magnetic field ($B > 3\text{T}$), ground state energies E_1 and absolute value of Coulomb energy $|E_c|$ increases with magnetic field strength B , and the distance between $E_1 - B$ curves of different angular momentum ($m = -1, -2, -3$) are pulled apart by Coulomb field of positive charge placed in the center; As quantum ring radius r_0 increase, every $E_1 - r_0$ curve has a minimum position r_{00} , which decreases as the magnetic field strength B increasing, and the distance between $E_1 - r_0$ curves in different magnetic field strength B are pulled closely by Coulomb field of positive charge placed in the center; The absolute value of Coulomb energy $|E_c|$ decreases linearly as the magnetic field strength B increasing. The ground state energies E_1 increase with harmonic potential $\omega_0\hbar$, the $E_1 - \omega_0\hbar$ curves of different angular momentum ($m = -1, -2, -3$) cross each other under the impact of Coulomb field, which lead to a change of the energy levels in the order. The absolute value of Coulomb energy $|E_c|$ decreases nonlinearly as $\omega_0\hbar$ increasing.

Key words: B-spline technique; quantum ring; ground state energies

近年来, 随着现代纳米加工技术的飞速发展, 国内外材料合成和生长等实验技术已可制备不同形

状的量子点和量子环结构, 它们在理论研究和光电器件研制中的潜在应用价值受到极大的关注。其中

^{*} 收稿日期: 2009-07-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10874122); 广东省自然科学基金资助项目 (8151030301); 广东第二师范学院教授博士专项经费资助项目

作者简介: 惠萍 (1962 年生), 女, 教授; E-mail: huiping519@tom.com

量子环结构具有更高的震荡强度和发光峰位, 这些系统结构会显示出奇特的物理性质, 例如持久电流, Aharonov-Bohm 振荡等。对量子环纳米结构的理论和实验研究有很多进展^[1-5], 实验上可以通过测量量子环的光学性质分析出量子环的能谱, 这些人造量子环结构材料的光学性质与量子环的尺寸、外场等因素有很强的依赖关系, 可以通过这些因素控制材料的光电性质, 因此量子环结构材料在光电器件中应用方面具有广泛的前景。理论计算上, 这种纳米结构性质的研究需要从量子力学出发^[6-8], 求解由电子构成的微观少体系统的薛定谔方程, 继而可以得到我们感兴趣的物理量和解释量子环的光电性质。众所周知, 求解多体薛定谔方程是一项较困难的工作, 一般采用有效的数值计算方法。本文将讨论磁场中 GaAs 量子环的能量和量子尺寸效应。关于 GaAs 量子环的研究有很多进展, 例如: Lorke 成功解释了磁场中一维无限细 GaAs 量子环 Aharonov-Bohm 振荡效应^[9], 文献 [10] 制备了 GaAs 量子单环和双环, 文献 [11] 研究了有限方势阱 InAs/GaAs 在抛物势量子环中的电子结构等, 本文用 B 样条技术计算强磁场中 GaAs 量子环能量。

1 理论模型

采用平面坐标系 (r, φ) , 设量子环中心为坐标原点。放一个正电荷 (电荷为 $+Ze$) 在坐标原点上, 设 r 为环中电子相对于坐标原点的位置矢量, 电子在谐振子势的束缚场中运动, 这种量子环的情况要比量子点的情况复杂些^[12]。量子环的半径用 r_0 表示, 我们在量子环的垂直方向 (z 轴方向) 加上均匀磁场 B , 体系的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2\mu}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r - r_0)^2 - g^*\mu_B B m_s - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \quad (1)$$

一个电子平面极坐标 (r, φ) 下的波函数为

$$\psi(r, \varphi) = \sum_j C_j \psi_j(r, \varphi) = \sum_j C_j \frac{1}{\sqrt{2\pi}} B_{j,k}(r) e^{im\varphi} \quad (2)$$

其中 C_j 为展开系数, $B_{j,k}(r)$ 为径向 k 阶 B 样条函数^[13]。哈密顿量写为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r - r_0)^2 + \frac{1}{2}\mu \frac{\omega_c^2}{4} r^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} +$$

$$\frac{\omega_c}{2} \hbar m - g^* \mu_B B m_s \quad (3)$$

其中 μ 为电子在半导体材料 GaAs 中的有效质量, 对于半导体 GaAs 材料 $\mu = 0.067m_e$, $\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r - r_0)^2$

为谐振势, $\omega_c = \frac{eB}{\mu}$, GaAs 材料的介电常数 ϵ 为

12.4, $\frac{\omega_c}{2} \hbar m$ 为电子角动量的贡献项。 $-g^* \mu_B B m_s$ 为 Zeeman 能量, g^* 为半导体材料对应的朗德因子, μ_B 为 Bohr 磁子, 其中 $g^* \mu_B B = 0.02547 \times B(T)$ 。薛定谔方程简化为

$$H\psi(r, \varphi) = E\psi(r, \varphi) \quad (4)$$

解方程 (4) 的矩阵方程可得到本征能量 E ($E_1, E_2, E_3, \dots$) 和库仑势能

$$E_C = \left[\psi(r, \varphi) \left| -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \right| \psi^*(r, \varphi) \right] \quad (5)$$

2 计算结果

由于 B 样条函数有很好灵活性和可缩性, 本文采用 7 节样条函数和 30×30 矩阵使计算结果收敛到 (10^{-6} meV)。量子环系统的轨道角动量在 z 轴方向的分量 $\hat{L}_z$ 为守恒量, 其量子数 m 是好量子数, 下面计算对应不同磁场、不同量子环半径、不同量子数 m 的量子环基态能量和库仑能。

2.1 改变磁场大小观察能量的变化

设 $r_0 = 30$ nm; $\omega_0 \hbar = 3$ meV, $m_s = 1/2$, 环中心的电荷 $Z = 1e$, 下面计算不同 m 下量子环的基态能量 E_1 (meV) 和库仑能 E_C (meV) 随磁场 B (T) 的变化曲线。图 1 中实线是环中心放置电荷时 $E_1 - B$ 曲线, 随着 $|m|$ 的增大, 曲线极小值的位置向右移动, 不同 m 对应的曲线是交叉的, 强磁场下 ($B > 3$ T) $|m|$ 越小 E_1 随 B 增加越快。虚线是 $E_1 - B$ 曲线, 环中心电荷的库仑场使不同角动量的 $E_1 - B$ 曲线的间距拉开, 而且曲线下移, 曲线的交叉现象消失, 能级次序发生改变。环中心电荷的库仑作用使 E_1 随 B 增加的速度变缓。由于量子环半径越约为 $r_0 = 3 \times 10^{-8}$ m, 其平方为很小量, 当磁场 B 较小 ($B < 5$ T) 时, ω_c^2 项仍然起重要作用, $E_1 - B$ 曲线近似为抛物线形状, 但当磁场 $B > 5$ T 时, ω_c^2 项的作用可以忽略, 因此 $E_1 - B$ 曲线接近线性; 公式 (3) 中的第四项和第五项是对朗道能级的贡献, 外磁场的作用不仅使电子受洛伦兹力, 而且还有回旋轨道的量子化, 而环中心放置电荷后轨道能级完全被拉开。轨道角动量 $m = 0$ 时, 无轨道与磁

场的相互作用, 库仑场的作用使 E_1 急剧降到小于 -20 meV, 由于曲线太低, 在图 1 没有给出。图 2 显示: 在强磁场 ($B > 3$ T) 中和不同轨道角动量 m 下, 库仑能随强磁场 B 是线性变化, 磁场越强 $|E_c|$ 越大。

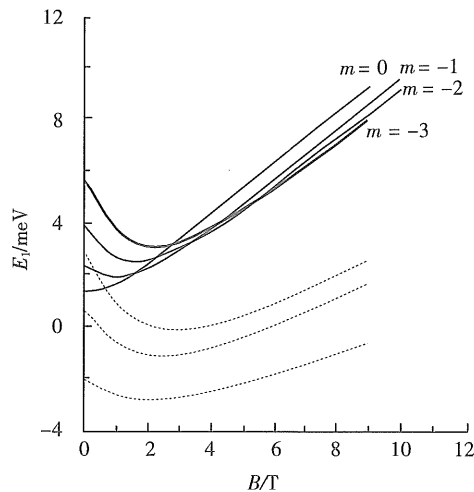


图 1 基态能量随磁场大小的变化

Fig. 1 The Ground State energies as a function of magnetic field strength on quantum ring radius

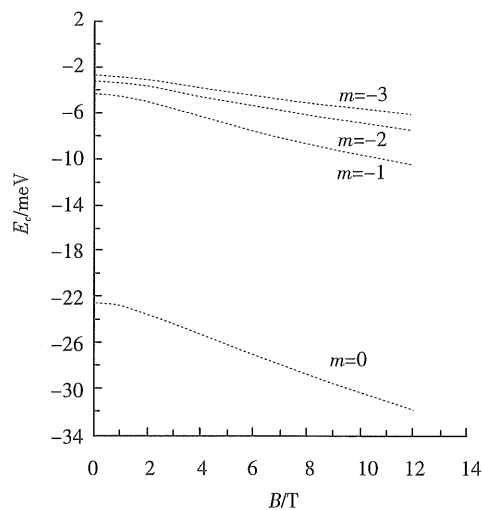


图 2 库仑能随磁场强度的变化

Fig. 2 The Ground Coulomb energies as a function of magnetic field strength in quantum ring radius

2.2 改变量子环的半径观察能量的变化

设 $m = -1$, $m_s = 1/2$, 计算不同磁场下的 E_1 和 E_c 随量子环半径的变化规律。图 3 中实线是环中心无电荷时的 $E_1 - r_0$ 曲线, 虚线是环中心有电荷时的 $E_1 - r_0$ 曲线, 由图 3 看到: 磁场越强 E_1 越大, E_1 极小值位置 r_{00} 随着磁场强度的增加而减小。

环中心有电荷时, $E_1 - r_0$ 曲线宽度被压缩。图 4 中的 $|E_c|$ 随着量子环的增加而线性减小。

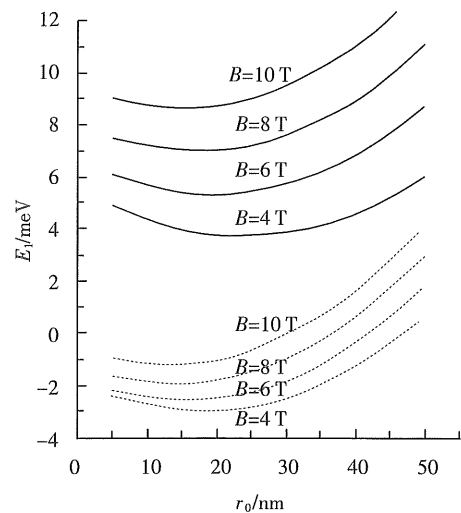


图 3 基态能级随量子环半径的变化

Fig. 3 The Ground State energy levels as a function of quantum ring radius

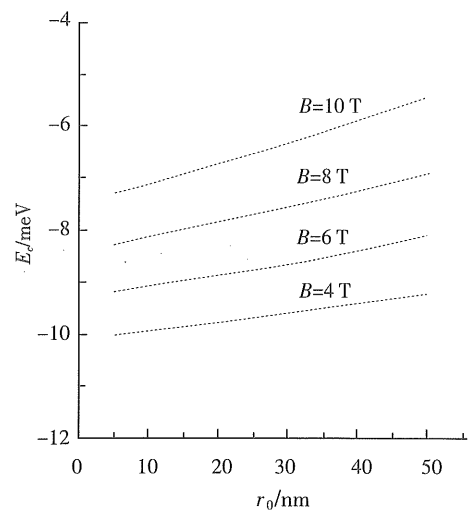


图 4 库仑能随量子环半径的变化

Fig. 4 The Coulomb energies as a function of quantum ring radius

2.3 改变谐振子势大小观察能量的变化

设 $B = 11$ T, $r_0 = 30$ nm, $m_s = 1/2$, 从图 5 看到, m 从 0 变到 -3 , 曲线斜率逐渐变小, E_1 随着谐振子势 $\omega_0 \hbar$ 的增大而增大, 环中心无电荷时曲线 (实线) 在 $\omega_0 = 0$ 处汇合, 但环中心加上电荷时, 由于库仑场的作用使不同角动量 m 下的 $E_1 - \omega_0 \hbar$ 曲线 (虚线) 出现交叉现象, 即能级次序发生变化。图 6 展示了不同角动量 m 下的 $|E_c|$ 随谐振子势增加而明显减小, 特别在 $m = 0$

时, 对应的 $|E_c|$ 随着 $\omega_0 \hbar$ 的增加急剧减小, 随着 $\omega_0 \hbar$ 的增加所有曲线最终趋于重合。

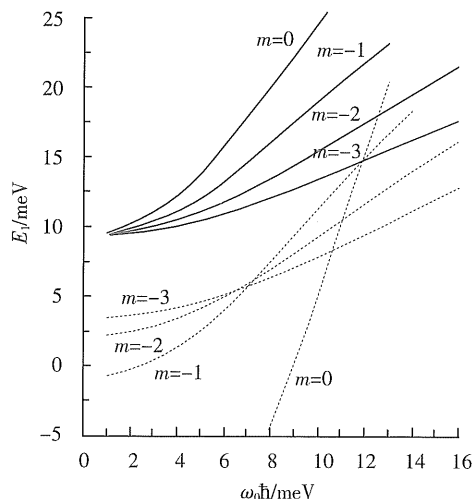


图5 基态能级随谐振子势的变化

Fig. 5 The Coulomb State energies as a function of harmonic potential

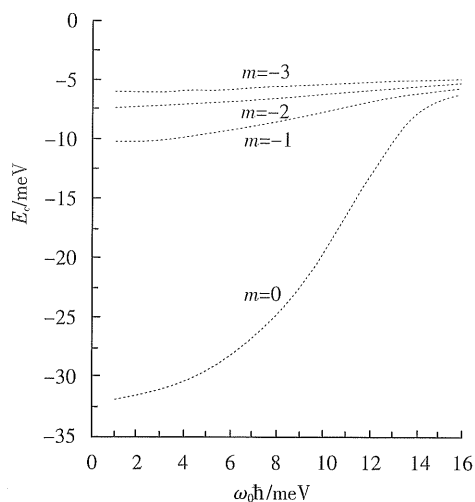


图6 库仑能随谐振子势的变化

Fig. 6 The Coulomb energies as a function of harmonic potential

3 总 结

本文从量子力学的薛定谔方程出发, 计算了强磁场下 GaAs 量子环中能量, 由于系统受库仑势和谐振子势及磁场的共同作用, 在调节谐振子势和磁场大小时, 基态能量变化曲线的交叉现象或出现或消失, 即能级次序发生了变化, 不同角动量下的能级关系出现另人感兴趣的现象。这种方法可以继续用于研究多电子多环半导体结构, 对从理论上去理

解和解释纳米半导体量子环的光学性质很有意义。

参考文献:

- [1] RAMIREZ-BON R, ESPINOZA-BELTRAN F J, ARIZPE-CHAVEZ H. CdTe nanostructures prepared by thermal annealing [J]. Journal Application Physics, 1995, 77 (10): 5461 - 5463.
- [2] TAKA AKI M, TAKASHI K, STEFANO S, et al. Self-Assembly of concentric quantum double rings [J]. Nano letters, 2005, 5 (3): 425 - 428.
- [3] KURODAA T, MANO, T, OCHIAI T, et al. Excitonic transitions in semiconductor concentric quantum double rings [J]. Physica E, 2006, 32 (1 - 2): 46 - 48.
- [4] FAIZABADI E, OMIDI M. Disorder-averaged currents in edged topological disordered mesoscopic cylinder [J]. Physics Letters A, 2009, 373 (16): 1469 - 1477.
- [5] PUNEGOV V I. Theory of diffuse X-ray scattering from an epitaxial layer with quantum rings [J]. Technical Physics Letters A, 2009, 35 (1): 20 - 22.
- [6] LIU Y M, BAO C G, SHI T Y. Few-electron quantum rings in a magnetic field: Ground-state properties [J]. Physical Review B, 2006, 73: 113313 - 1 - 4.
- [7] AICHINGER M, Chin S A, KROTSHECK E, et al. Effects of geometry and impurities on quantum rings in magnetic fields [J]. Physical Review B, 2006, 73: 195310 - 1 - 8.
- [8] KEYSER U F, FUHNER C, BORCK S. Kondo effect in few-electron quantum ring [J]. Physics Review letters, 2003 (90): 196601 - 1 - 4.
- [9] BAO C G, HUANG G M, LIU Y M. Symmetry background of the fractional aharonov-bohm oscillation and oscillation in dipole-transitions of narrow quantum rings with a few-electrons [J]. Physical Review B, 2005, 72 (19): 195310 - 1 - 6.
- [10] AXELL L, JOHANNES L R, ALEXENDER G O, et al. Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings [J]. Physical Review letters, 2000(84): 2224 - 2226.
- [11] GONG Z, NIU C S, HUANG S, et al. Formation of GaAs/AlGaAs and in GaAs/GaAs nanorings hydroplet molecular-beamepitaxy [J]. Applied Physics Letters, 2005 (87): 093116 - 1 - 3.
- [12] 黄钢明, 刘益民. GaAs 量子点中电子结构和角动量的对称性分析 [J]. 中山大学学报: 自然科学版, 2009, 48(6): 33 - 37.
- [13] 惠萍, 黄钢明. CdSe 量子点系统库仑相互作用能的量子尺寸效应 [J]. 中山大学学报: 自然科学版, 2004, 43(4): 39 - 43.