

磁场和带电杂质对2电子量子点的综合效应*

李小珠¹, 刘益民¹, 黄钢明²

(1. 韶关学院物理系, 广东韶关 512005;
2. 中山大学理工学院, 广东广州 510275)

摘要: 研究了在磁场 B 中受带电杂质影响的2维2电子量子点的特性。带电杂质被固定在 z 轴上且与量子点所在的平面的距离为 d 。用直接对角化方法获得了2电子量子点的低态能谱, 计算了其基态角动量 L_0 和自旋 S_0 随 B 、 d 的演化, 归纳结果于 (L_0, S_0) 相图中。 (L_0, S_0) 图表明: 基态 L_0 和 S_0 跃迁以特殊的方式匹配。

关键词: 量子点; 磁场; 杂质; 基态

中图分类号: O488 文献标志码: A 文章编号: 0529-6579(2010)03-0038-04

The Combined Effect of a Magnetic Field and a Charged Impurity on a 2-Electron Quantum Dot

LI Xiaozhu¹, LIU Yimin¹, HUANG Gangming²

(1. Department of Physics, Shaoguan University, Shaoguan 512005, China;

2. Physics Science and Engineering Institute, Sun Yat-sen University, Guangzhou, 510275, China)

Abstract: The property of a 2-dimensional 2-electron quantum dot (QD) subjected to an external magnetic field B and affected by a charged impurity is studied. The impurity is located at the z -axis by a distance d from the plane of the dot. The energy spectra of low-lying state of the QD are obtained by the exact diagonalization approach. The evolution of the angular momentum L_0 and the spin S_0 of the ground state in accord with B and d has been calculated, the results are summarized and plotted in a (L_0, S_0) diagram. The (L_0, S_0) diagram indicates that the transitions of L_0 and S_0 are matched in peculiar way.

Key words: quantum dot; magnetic field; impurity; ground state

随着纳米技术的发展, 目前已可制备各种不同形状(盘状、球状, 椭球状等)、不同尺寸(几纳米到几百纳米)的量子点^[1-3]。近十多年来, 少电子量子点已被广泛地研究。早在1993年, Wolfgang等计算了2至4电子量子点的能谱^[4]。我们于2004年获得了3电子量子点的基态相图^[5]。2005年, Moriyama等探讨了4电子量子点的壳层结构^[6]。具有电子与电子($e-e$)关联和低态跃迁的最简单的量子点是包含2个电子的量子点。2电子量子点也称为氦量子点。Xie获得了带有正杂质的氦量子点

(即 D^- 系统)的特性对杂质的距离 d 的依赖性规律^[7]。文献[8]研究了1和2电子量子点的辐射跃迁。Harju等绘制了2电子量子点的自旋相图, 指出其在量子计算机中的应用^[9]。尽管2电子量子点的上述特点已被研究, 然而, 在含杂质的情况下, 其性质在以前的文献中还未深入探讨和总结。作为文献[10]的继续, 本文详细探讨在磁场中受到带电杂质作用的2电子量子点的性质, 并进行相应的分析。

* 收稿日期: 2009-05-22

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10874122, 10747146, 10847167); 广东省自然科学基金资助项目(06300345, 7007806, 8451027501001445); 波谱与原子分子物理国家重点实验室基金资助项目(T152615)

作者简介: 李小珠(1964年生), 女, 副教授; 通讯作者: 刘益民; E-mail: lym84111766@163.com

1 2 电子量子点哈密顿量

考虑在二维平面（设为 $x - y$ 平面）上一个包含 2 个电子的量子点，对其施加垂直于 $x - y$ 平面的外部磁场 B ，且其附近存在一个电量为 q 的带电杂质（设在 z 轴上）。又设量子点的限制势为频率 ω_0 的轴对称抛物势，则在磁场中 2 电子量子点的哈密顿量为

$$H = \sum_{j=1}^2 \left[\frac{1}{2m_e^*} (\mathbf{p}_j - e \mathbf{A}_j)^2 + \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 r_j^2 \right] + V_1 + V_2 - g^* \mu_B B \sum_{j=1}^2 s_{jz} \quad (1)$$

$$V_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{12}} \quad (2)$$

$$V_2 = \sum_{j=1}^2 \frac{-eq}{4\pi\epsilon \sqrt{d^2 + r_j^2}} \quad (3)$$

式中 $r_j(\mathbf{p}_j)$ 是以量子点中心为原点的第 j 个电子的位置矢量（动量）， $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ， d 是带电杂质与 $x - y$ 平面的垂直距离。 m_e^* 是电子的有效质量， ϵ 为介电常数。取矢势 $\mathbf{A} = (B/2)(-y, x, 0)$ ，则

$$\begin{aligned} \dot{H} = & \sum_{j=1}^2 \left(\frac{p_j^2}{2m_e^*} + \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 r_j^2 \right) - \\ & \frac{1}{2} \omega_c L_z + V_2 + V_1 - g^* \mu_B B S_z \end{aligned} \quad (4)$$

式中 $\omega_c = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}$ ，回旋频率 $\omega_c = |e|B/m_e^*$ ， g^*

为有效朗道因子， μ_B 为电子的磁矩。设 l_{jz} 、 s_{jz} 分别为第 j 个电子的角动量和自旋在 z 轴上的投影，则 $L_z = \sum_{j=1}^2 l_{jz}$ 、 $S_z = \sum_{j=1}^2 s_{jz}$ 分别为总轨道角动量 L 、总自旋 S 在 z 轴上的投影，单位为 \hbar 。 L_z 取 L ， S_z 取 S ，以便获得最低能量。在下面计算中，选取适应于 GaAs 量子点的参数，即 $m_e^* = 0.067m_e$ (m_e 为电子的质量)， $\epsilon = 12.4\epsilon_0$ 和 $\hbar\omega_0 = 3 \text{ meV}$ ；能量、长度和磁场的单位分别取 meV、nm 和 Tesla (T)。

2 结果与讨论

采取直接对角化 H 方法^[4]，可获得 2 电子量子点的本征能和本征态。用 (L, S) 表示量子点的态，其中 L 和 S 分别表示这个态的角动量和总自旋；而量子点的基态用 (L_0, S_0) 表示，其中 L_0 和 S_0 表示该基态的角动量和总自旋。当 $d = 0$ 时，2 电子量子点的低态能级 E 随 B 的变化如图 1 所示，其中子图 (a)、(b)、(c) 分别表示一个负杂质 ($q = -|e|$)、一个正杂质 ($q = |e|$)、一个中性杂质 ($q = 0$) 的情形。图中的数字表示态的 L 。实线和虚线分别表示 $S = 0$ 和 1 自旋态。

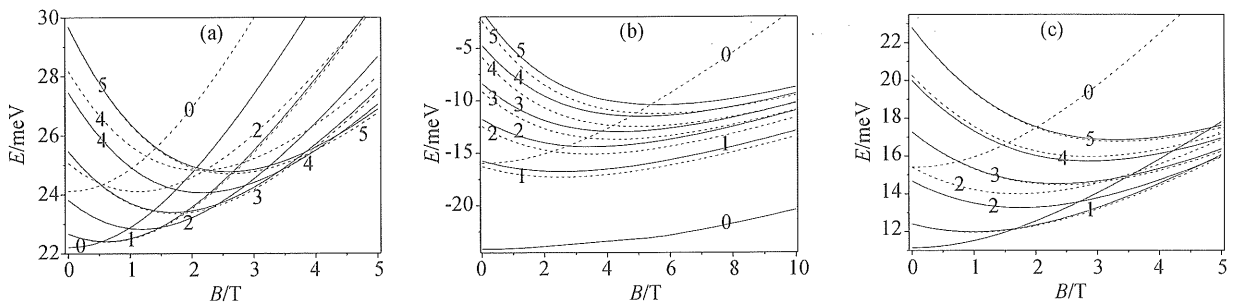


图 1 2 电子量子点的低态能级随 B 的演化

Fig. 1 The evolution of the low-lying levels of a 2-electron QD against B

由图 1 可知：2 电子量子点的低态能级 E 随磁场 B 的变化规律与 3 电子量子点的基本相同^[10]，即当 $d = 0$ 时，①除了 $L = 0$ 能级的 E 随 B 增加而增加之外，所有其它 L 的能级首先随 B 增加而逐渐减小，达到最小值之后再增加。能量 E 增加还是减小是由哈密顿量中正项 $\sum_{j=1}^2 m_e^* \omega_0^2 r_j^2 / 8$ （正比于 B^2 ）和负项 $-\omega_c L / 2$ （正比于 B ）所决定。当 B 较小时，负项比正项更重要，因而能量曲线下降。然而，当 B 较大时，由于正项与 B^2 成正比，从而正

项大于负项的绝对值，因此 E 随 B 增加而增加。对于 $L = 0$ 能级， $-\omega_c L / 2 = 0$ ，正项完全决定能量的变化，因而 E 随 B 的增加而增加。②在负杂质的情形下，当 B 增加时，基态发生如下跃迁： $(L_0, S_0) = (0, 0) \rightarrow (1, 1) \rightarrow (2, 0) \rightarrow (3, 1) \rightarrow (4, 0) \rightarrow (5, 1)$ 。在中性杂质（或者说没有杂质）的情形下，基态随 B 增加也发生跃迁，即 $(L_0, S_0) = (0, 0) \rightarrow (1, 1)$ 。基态跃迁主要与负项 $-\omega_c L / 2 = -eBL / (2m_e^*)$ （正比于 B 和 L ）相关。当 B 增加时，较大 L 态的能量减小得快，从而不同 L 的能级

从小到大的次序发生改变, 导致基态跃迁。在正杂质的情形下, 没有基态跃迁, 这与文献 9、11-13 的结论一致。③ 在负杂质和中性杂质的情形下基态能量有降有升, 总的趋势是增加。

对于其它的 d , 通过计算获得了类似于图 1a 和 b 的低态能级图, 由此绘出如图 2 所示的基态 (L_0, S_0) 相图, 其中子图 (a)、(b) 分别表示一个负杂质 ($q = -|e|$)、一个正杂质 ($q = |e|$) 的情形。图中每个基态都用一对量子数 (L_0, S_0) 表示。下面通过图 2 研究磁场和带电杂质对 2 电子量子点的综合效应。

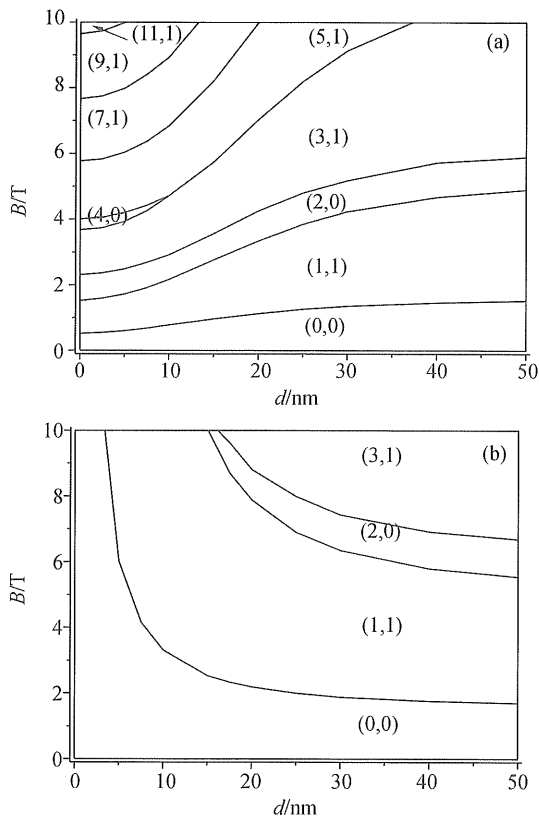


图 2 2 电子量子点的基态相图

Fig. 2 The phase-diagram of the ground states of a 2-electron quantum dot

由图 2a 可见, 在 d 一定时, 当 B 增加, 基态发生跃迁。与负杂质 ($q = -|e|$) 相反, 图 2b 表明: 在 $d = 0$ 及其附近时, 正杂质 ($q = |e|$) 的出现完全禁止基态的跃迁; 然而, d 较大时, 基态随 B 增加也发生跃迁。

由图 2 得, B 的增加时, L_0 增加, S_0 相应地发生跃迁。 L_0 的增加主要起源于 H 量中的线性项 $-\omega_c L/2$, 而 S_0 的跃迁起源于对称性效应。在较弱磁场区域, 当 B 增大时, 基态 L_0 的每次增加值为 1,

S_0 相应地发生改变。由图 2 可以看出, $S_0 = 1$ 态的区域比 $S_0 = 0$ 态的要大。如果 B 足够强, $S_0 = 0$ 态将消失。这种现象可以用 Zeeman 效应来解释。在强磁场区域, Zeeman 效应的贡献充分地降低自旋极化态 ($S_0 = 1$ 态) 的能量, 从而使基态都为 $S_0 = 1$ 态, L_0 的每次增加值则变为 2。这个特性在负杂质的情形下尤其明显。

对于负杂质, B 一定时, d 的增加常常导致 L_0 的减小 (参见图 2a)。例如, 如果 B 为 5, 当 d 从 0 连续变化到 50 时, 则 (L_0, S_0) 的跃迁是 $(5, 1) \rightarrow (3, 1) \rightarrow (2, 0)$ 。显然, d 越大, 负杂质与量子点中的电子之间库仑排斥力越弱, 量子点的尺寸就越小, 从而 L_0 变小。因此, 当 d 增加时, L_0 较小的态更容易成为基态。这是 d 增加促使 L_0 减小的原因。显而易见, 正杂质将引起相反的效果, 正如图 2b 所示。

在图 2 中 L_0 和 S_0 的跃迁以如下方式匹配: 如果 $L_0 = 2n (n = 0, 1, 2, \dots)$, 则 $S_0 = 0$; 如果 $L_0 = 2n + 1$, 则 $S_0 = 1$ 。若量子点中的 2 个电子与量子点的中心构成一条直线, 简称共线构形 (collinear straight-line), 记为 COL。对于 COL 形, 2 个电子的距离最大, 相互间的势能最小, 从而保证基态能量最低。为了使基态的电子结构为 COL 形, L_0 和 S_0 必须以上述方式匹配^[14-16]。

3 结 论

综上所述, 本文首先获得了在不同带电杂质的情形下 2 电子量子点的低态能级随 B 的变化规律。其次, 研究了在磁场中受带电杂质影响的 2 电子量子点的基态, 主要结果是绘制了基态相图, 即 (L_0, S_0) 相图。这些相图清晰地显示量子点基态如何随磁场 B 和带电杂质的距离 d 而变化。由于带电杂质的影响是显著的, 故除了磁场, 带电杂质也可以当作控制量子点的性质的工具。

参考文献:

- [1] BEDNAREK S, SZAFRAN B, ADAMOWSKI J. Many-electron artificial atoms [J]. Phys Rev B, 1999, 59 (20): 13036-13042.
- [2] PUNTES V F, KRISHNAN K M, ALIVISATOS A P. Colloidal nanocrystal shape and size control: The case of cobalt [J]. Science, 2001, 291 (16): 2115-2117.
- [3] HENNESSY K, BADOLATOL A, WINGERL M, et al. Quantum nature of a strongly coupled single quantum dot-cavity system [J]. Nature, 2007, 445: 896-899.
- [4] WOLFGANG H, BERNHARD K. Interacting electrons in

- a one-dimensional quantum dot[J]. *Phys Rev B*, 1993, 47 (24): 16353 – 16357.
- [5] LIU Y M, HUANG G M, BAO C G. Phase diagram of a three-electron quantum dot with an impurity [J]. *Phys Rev B*, 2004, 70 (7): 073313 [4 pages].
- [6] MORIYAMA S, FUSE T, SUZUKI M. Four-electron shell structures and an interacting two-electron system in Carbon-nanotube quantum dots [J]. *Phys Rev Lett*, 2005, 94 (18): 186806 [4 pages].
- [7] XIE W F. Barrier D^- quantum dots in magnetic fields [J]. *J Phys: Condens Matter*, 2000, 12: 3849 – 3856.
- [8] TOSHIMASA F, DAVID G A, YASUHIRO T et al. Allowed and forbidden transitions in artificial hydrogen and helium atoms [J]. *Nature*, 2002, 419: 278 – 281.
- [9] HARJU A, SILJAMAKI S, NIEMINEN R M. Two-electron quantum dot molecule; composite particles and the spin phase diagram[J]. *Phys Rev Lett*, 2002, 88(22): 226804 [4 pages].
- [10] LIU Y M, HUANG G M. Effect of a charged impurity on quantum dot lithium[J]. *Modern Physics Letter B*, 2003, 17 (18): 973 – 981.
- [11] CONSTANTINE Y, UZI L. Formation and control of electron molecules in artificial atoms: Impurity and magnetic-field effects [J]. *Phys Rev B*, 2000, 61 (23): 15895 – 15904.
- [12] LEE C M, LAM C C. Polaron effect on low-lying energy spectrum of two electrons bound to a Coulomb impurity in a quantum dot [J]. *Phys Rev B*, 2000, 61 (15): 10376 – 10382.
- [13] XIE W F. Impurity effect on low-lying spectra in a two-electron quantum dot with parabolic confinement [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2003, 334 (3/4): 317 – 322.
- [14] BAO C G. Large regions of stability in the phase diagrams of quantum dots and the associated filling factors [J]. *Phys Rev Lett*, 1997, 79 (18): 3475 – 3477.
- [15] BAO C G. The symmetry background underlying the ring structures of quantum dots and a classification scheme [J]. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14 (36): 8549 – 8561.
- [16] 黄钢明, 刘益民. GaAs 量子点中电子结构和幻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.

(上接第 27 页)

参考文献:

- [1] FASINO D, INGLESE G. An inverse problem for Laplace's equation; theoretical results and numerical methods [J]. *Inverse Problems*, 1999, 15: 41 – 48.
- [2] ALESSANDRINI G, DEL PIERO L, RONDI L. Stable determination of corrosion by single electrostatic boundary measurement [J]. *Inverse Problems*, 2003, 19: 973 – 984.
- [3] CHAABANE S, JAOUA M. Identification of Robin coefficients by means of boundary measurements [J]. *Inverse Problems*, 1999, 15: 1425 – 1438.
- [4] INGLESE G. An inverse problem in corrosion detection [J]. *Inverse Problems*, 1997, 13(4): 977 – 994.
- [5] KAUP P G, SANTOSA F. Nondestructive evaluation of corrosion damage using electrostatic measurements [J]. *J Nondestruct Eval*, 1995, 14: 127 – 136.
- [6] SANTOSA F, VOGELIUS M, XU J M. An effective nonlinear boundary condition for corroding surface. Identification of damage based on steady state electric data [J]. *Z Angew Math Phys*, 1998, 49: 656 – 679.
- [7] VOGELIUS M, XU J M. A nonlinear elliptic boundary value problem related to corrosion modeling [J]. *Q Appl Math*, 1998, 56: 479 – 505.
- [8] LIN F R, FANG W F. A linear integral equation approach to the Robin inverse problem [J]. *Inverse Problems*, 2005, 21: 1757 – 1772.
- [9] KRESS R. *Linear integral equations* [M]. 2nd ed. New York: Springer, 1999.
- [10] MAZYA V G. *Boundary integral equations* [M]. New York: Springer, 1991: 127 – 222.
- [11] ATKINSON K E. *The numerical solution of integral equations of second kind* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [12] VOGEL C R. *Computational methods for inverse problem* [C]. Society for Industrial Applied and Mathematics (SIAM), 2002.