

磁场和杂质对二维 3 电子量子点基态的影响^{*}

刘益民^{1,2}, 李小珠¹, 黄钢明²

(1. 韶关学院物理学系, 广东 韶关, 512005;

2. 中山大学物理学系, 广东 广州, 510275)

摘 要: 使用少体物理方法, 计算了在不同的磁场、杂质作用下二维 3 电子量子点基态的能量和角动量, 获得了它们受磁场和杂质影响的结果, 并且从动力学和对称性两方面对结果进行了分析。

关键词: 磁场; 杂质; 量子点; 基态

中图分类号: O413.1 文献标识码: A 文章编号: 0529-6579 (2003) 01-0024-04

近年来, 由于实验技术的迅猛发展, 出现了一批各式各样的人造微系统, 其尺度约在纳米至微米的范畴。由于这些微系统的性质可以人为地加以控制, 因而具有极大的应用价值 (如作为微型电子器件、作为连续可调的相干辐射源等), 将在微器件制造业 (如微计算机、微动力装置、微激光器、微机器人等) 中扮演重要角色, 可以毫不夸张地说, 人造微系统在 21 世纪的科技发展中起关键作用。

本文研究的微系统是由 3 个电子束缚于二维谐振子势所形成的系统, 即二维 3 电子量子点。量子点是半导体的一类纳米结构。Huant 等^[1] 首先报道在 GaAs/AlGa 中发现了量子点的存在。不久, 在实验上成功地获得束缚势为抛物面、包含较少电子数的量子点^[2,3], 而且将量子点制成不同的形状, 如柱形、球形^[4]。从理论和实验方面来看, 二维量子点的研究更具有吸引力。因此, 对二维量子点进行了大量的开创性的研究工作, 发现了一些重要现象 (如幻角动量^[5])。由于二维量子点较易控制, 故在将来发展微器件技术方面必不可少。在强磁场中包含较少电子数的量子点已被广泛地研究^[6], 但是, 任意磁场和带电杂质对二维量子点基态的效果, 这方面的研究仍然缺乏。本文使用少体物理方法, 获得了磁场和杂质对二维 3 电子量子点基态影响的计算结果, 并且从动力学和对称性两方面对结果进行了分析。

1 理 论

考虑在 GaAs 表面 (设为 $x-y$ 平面) 上一个 3 电子量子点, 对其施加垂直于 GaAs 表面的外部磁

场, 且其附近存在一个带电杂质 (设在 z 轴上), 则其物理模型为受到磁场和杂质作用的二维 3 电子量子点。设 3 个电子处于 $\hbar\omega_0$ 的谐振子场下, 磁场 B 沿 z 轴正方向, 则系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p}_j - e\mathbf{A}_j)^2 + \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 \mathbf{r}_j^2 + \sum_{j>k}^3 \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{jk}} + \sum_{j=1}^3 \frac{qe}{4\pi\epsilon \sqrt{d^2 + r_j^2}} - g^* \mu_B B \sum_{j=1}^3 s_{jz} \quad (1)$$

式中, $\mathbf{r}_j$ 是第 j 个电子的位置矢量, r_{jk} 为第 j 个到第 k 个电子的距离, d 是电荷为 q 的固定杂质与 3 个电子所在 $x-y$ 平面的垂直距离。 m^* 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

$$H = \sum_{j=1}^3 \left(\frac{p_j^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_e^2 r_j^2 \right) + \frac{1}{2} \omega_c \sum_{j=1}^3 l_{jz} + \sum_{j>k}^3 \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{jk}} + \sum_{j=1}^3 \frac{qe}{4\pi\epsilon \sqrt{d^2 + r_j^2}} - g^* \mu_B B \sum_{j=1}^3 s_{jz} \quad (2)$$

式中, $\omega_e = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2/4}$, $\omega_c = |e|B/m^*$, p_j 为第 j 个电子的动量, g^* 为有效朗道因子, μ_B 为电子的磁矩, 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 $L_z = \sum_{j=1}^3 l_{jz}$ 、 $S_z = \sum_{j=1}^3 s_{jz}$ 分别为总轨道角动量 L 和总自旋角动量 S 在 z 轴上的投影, 单位为 $\hbar$ 。在下面计算中, L_z 取 $-L$, S_z 取 S , 以便获得最低能量。

为了计算的方便, 在 (2) 式中加、减 $m^* \Omega^2 \mathbf{r}_j^2/2$ 各一项, 重新定义

$$\xi_j = \sqrt{\frac{m^* \Omega}{\hbar}} \mathbf{r}_j \quad \left[D = \sqrt{\frac{m^* \Omega}{\hbar}} d \right]$$

* 收稿日期: 2002-06-04

基金项目: 国家自然科学基金重大研究计划资助项目 (90103028)

作者简介: 刘益民 (1965 年生), 男, 讲师, 中山大学在职博士生; E-mail: lym000139@163.com

$$\epsilon = \frac{E}{\hbar\Omega} \quad \left[h = \frac{H}{\hbar\Omega} \right]$$

E 为本征能, 则式 (2) 变为无量纲的形式

$$h = h_{\text{single}} + h_{\text{ee}} + h_{\text{ei}} + h_{\text{zeeman}} \tag{3}$$

而

$$h_{\text{single}} = \sum_{j=1}^3 \left[-\frac{1}{2} \nabla_{\xi_j}^2 + \frac{1}{2} \xi_j^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_c^2}{\Omega^2} - 1 \right) \xi_j^2 \right] + \frac{\omega_c}{2\Omega} L_z \tag{4}$$
$$h_{\text{ee}} = \sum_{j>k}^3 \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \sqrt{\frac{m^*}{\hbar^3\Omega}} \frac{1}{|\xi_j - \xi_k|} \tag{5}$$
$$h_{\text{ei}} = \sum_{j=1}^3 \frac{qe}{4\pi\epsilon} \sqrt{\frac{m^*}{\hbar^3\Omega}} \frac{1}{\sqrt{D^2 + \xi_j^2}} \tag{6}$$
$$h_{\text{zeeman}} = -\frac{g^* \mu_B B}{\Omega\hbar} S_z \tag{7}$$

可选择单粒子哈密顿量 $(-\nabla_{\xi}^2 + \xi^2)/2$ 的本征解 ϕ_{mk} 作为单粒子基。令 i 代表 (m, k, μ) , χ_{μ} 表示自旋波函数(自旋量子数 $\mu = 1/2, -1/2$), 则考虑自旋之后的单粒子基可写为 $\phi_i = \phi_{mk}(\xi) \chi_{\mu}$, 其中 m 和 k 分别是它的正转声子数和逆转声子数, 都取 $0, 1, 2, 3, \dots$ 。

3 电子量子点的基矢为单粒子波函数的乘积形式, 即乘积基。由于电子为费米子, 乘积基应该是反对称的, 故 3 电子量子点的基矢为

$$\Psi_{\alpha}(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \phi_{i_1}(\xi_1) & \phi_{i_1}(\xi_2) & \phi_{i_1}(\xi_3) \\ \phi_{i_2}(\xi_1) & \phi_{i_2}(\xi_2) & \phi_{i_2}(\xi_3) \\ \phi_{i_3}(\xi_1) & \phi_{i_3}(\xi_2) & \phi_{i_3}(\xi_3) \end{vmatrix} \tag{8}$$

上式左边的 1, 2, 3 分别表示 ξ_1, ξ_2, ξ_3 , α 代表各单粒子态正、逆转声子数组合的编号, 即 $\alpha = \{i_1, i_2, i_3\}$ 。

将式 (3)、(8) 代入无量纲哈密顿 h 的矩阵元 $\langle \Psi_{\alpha} | h | \Psi_{\alpha} \rangle$, 使用少体物理方法和泰米系数技术^[7-9], 可以快速准确地求出 h 的矩阵元。各个矩阵元组成哈密顿矩阵, 再将其对角化, 即可求出 h 的本征能。式 (8) 中 α 不同时, 基矢 Ψ_{α} 也不同, 共有无限多个, 计算时不可能全取。那么如何选取基矢? 这里的方法是限制 m_i 和 k_i 的大小 (本文令 $m_i \leq 10, k_i \leq 6$), 且总轨道角动量 L 为好量子数, $\sum_{i=1}^3 (m_i - k_i) = L$ 。即使如此, 基矢的数目仍然很多。为了减少基矢的个数, 采取如下措施: 先计算哈密顿矩阵对角线上的矩阵元 $h_{\alpha\alpha} = \langle \Psi_{\alpha} | h | \Psi_{\alpha} \rangle$, 然后从小到大排序, 最后只选取前面 J 个最小的 $h_{\alpha\alpha}$ 所对应的 Ψ_{α} 作为基矢。检验上述方法的可靠性, 只要将 J 加大到某个 J' 然后比

较 h 的本征能即可。例如, 当 $J = 1\,500$ 时, 比较 $J = 1\,500$ 的本征能 E 和 $J = 1\,600$ 相应的本征能 E' , 相对误差 $|E' - E|/|E|$ 小于 0.01% , 表明 $J = 1\,500$ 已足够精确, 这时哈密顿矩阵为 $1\,500$ 阶方阵。当磁场 B 和距离 d 一定时, 如何确定二维 3 电子量子点的基态? L 依次取 $0, 1, 2, \dots, N$, 总自旋 S 取 $1/2, 3/2$, 共 $2(N+1)$ 组 (L, S) 。求出 3 电子量子点的每组 (L, S) 的最小本征能, 称之为首态能。比较各组的首态能, 它们的最小值为基态能量, 相应的 L 和 S 为基态总轨道角动量和总自旋。

2 计算结果

对于 GaAs 量子点, 式 (3) 的参数分别取为 $m^* = 0.067m_e$ (m_e 为电子的质量), $\epsilon = 12.4\epsilon_0$ (ϵ_0 为真空介电常数), 束缚势 $\hbar\omega_0 = 3\text{ MeV}$, d 一般为几十 nm。

为了不失一般性, 选取不强亦不弱的磁场, 如 $B = 6\text{ T}$; 适中的距离, 如 $D = 25\text{ nm}$; 杂质电荷 $q = Z|e|$, Z 常常为 $-2, -1, 0, 1, 2$ 。计算了在不同 Z 下二维 3 电子量子点基态的本征能 E (单位 MeV)、总轨道角动量 L 、总自旋 S , 如图 1 所示。

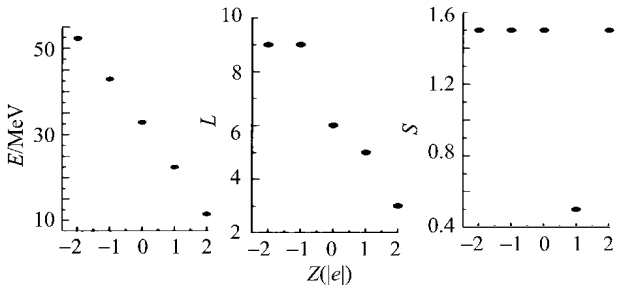


图 1 Z 改变时 E, L 和 S 的变化
Fig 1 The changes of E, L and S due to variation of Z

由图 1 可见, 杂质带负电时, E 较大, 3 电子量子点不易形成稳定的束缚态, 故在下面的计算中, 杂质的电量取正值。

选取 $B = 6\text{ T}$, $q = |e|$ 。 d (单位 nm) 不同时, E, L 和 S 的变化如图 2 所示。

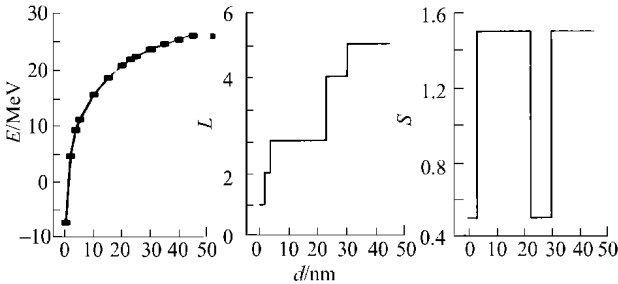


图 2 d 改变时 E, L 和 S 的变化
Fig 2 The changes of E, L and S due to variation of d

选取 $s=25\text{ nm}$, $q=|e|$. B 不同时, E 、 L 和 S 的变化如图 3 所示.

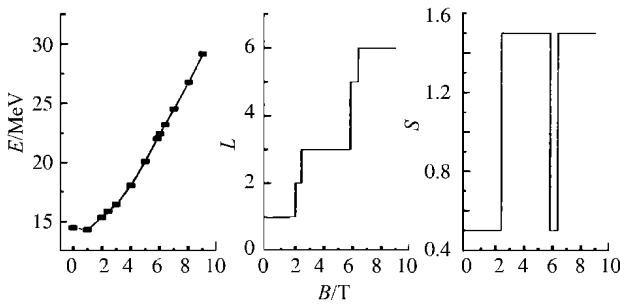


图 3 B 改变时 E 、 L 和 S 的变化

Fig 3 The changes of E , L and S due to variation of B

3 结论及其分析

下面从动力学规律和对称性两方面对上述结果进行分析. 先根据动力学分析.

图 1 表明, 杂质电荷 Z 依次取 -2 、 -1 、 0 、 1 、 2 时, E 减少, 这是因为杂质与量子点中电子之间相互作用能式 (6) h_a 减少; L 也减少, 这是由于杂质与量子点中电子之间相互作用力从排斥变为吸引, 量子点从大变小, 从而引起 L 减少.

图 2 表明, E 随 d 的增加而增加, 且 d 较小 ($\leq 10\text{ nm}$) 时, E 增加得快; d 较大 ($\geq 10\text{ nm}$) 时, E 增加得慢. 原因如下: Z 取 1 时, h_a 为负, h_a 随 d 的增加而增加. d 较小时, $|h_{ei}|$ 较大, 在 E 中占主要部分, 故 d 增加时 E 增加得快; d 较大时, $|h_a|$ 较小, 在 E 中占次要部分, 故 d 增加时 E 增加得慢. L 随 d 的增加而增加, 原因是: 杂质与量子点中电子之间相互作用力为吸引力, 它随 d 的增加而减少, 而量子点变大, 故 L 增加.

图 3 表明, E 先随 B 的增加而减小, 再随 B 的增加而增加, 这是由式 (4) h_{single} 和式 (7) h_{zeeman} 共同引起的. B 较小时,

$$\left| \left[-\frac{g^* \mu_B B}{\Omega \hbar} \sum_{j=1}^3 S_{jz} \right] + \frac{\omega_c}{2\Omega \hbar} \sum_{j=1}^3 l_{jz} \right| > \left| \sum_{j=1}^3 \left[-\frac{1}{2} \nabla_{\xi_j}^2 + \frac{1}{2} \xi_j^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_e^2}{\Omega^2} - 1 \right) \xi_j^2 \right] \right|$$

故 E 先随 B 的增加而减小; B 较大时,

$$\left| \left[-\frac{g^* \mu_B B}{\Omega \hbar} \sum_{j=1}^3 S_{jz} \right] + \frac{\omega_c}{2\Omega \hbar} \sum_{j=1}^3 l_{jz} \right| < \left| \sum_{j=1}^3 \left[-\frac{1}{2} \nabla_{\xi_j}^2 + \frac{1}{2} \xi_j^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_e^2}{\Omega^2} - 1 \right) \xi_j^2 \right] \right|$$

故 E 再随 B 的增加而增加. L 随 B 的增加而增加, 这是因为 B 增加时, 量子点中电子的速度也增加, 从而 L 增加.

再从对称性分析. 由图 1、2、3 可见, $L=3$ 、

6、9 等, $S=3/2$ 的基态较多. 究其原因, 与对称性有关^[10]. 二维 3 电子量子点有两个重要的构型: 正三角形和直线 (其中一个电子居中). 设 Φ_{hLS} 为 h 、 L 、 S 的本征波函数. $S=3/2$ 时, Φ_{hLS} 的自旋部分是对称波函数, 空间部分是反对称波函数 (用 ϕ 表示). 若三个电子构成一个正三角形, 则绕 z 轴转 $2\pi/3$ 之后, 等同于 3 个电子作一次轮换. 由于轮换等同于电子两次对换, 所以有

$$\exp(-i2\pi L/3) \phi = \phi$$

要使 $\phi \neq 0$, 必有 $L=3$ 、6、9 等. 因此, $S=3/2$ 时, 只有 $L=3$ 、6、9 等态才允许有正三角形构型. 而能量最低的态往往占据对称性强的几何构型, 故 $L=3$ 、6、9 等, $S=3/2$ 的基态较多.

笔者还求出了 $Z=1$, $B \geq 7\text{ T}$, $D \geq 20\text{ nm}$ 时二维 3 电子量子点的基态, 发现都是 $L=6$ 、9 等, $S=3/2$. 这是由动力学规律和对称性两方面共同决定. 根据上面所述, $L=6$ 、9 等, $S=3/2$ 的 3 电子量子点可访问最可几构型——正三角形; 又磁场较强时, 3 个电子自旋相同 ($S=3/2$), 距离较大时, 杂质的影响较弱, 因而 $L=6$ 、9 等, $S=3/2$.

同理, 二维 3 电子量子点的其它基态 (如 $L=1$ 、2、5 等, $S=1/2$) 都由动力学规律和对称性共同决定.

参考文献:

[1] HUANT S, NAJDA S P, ETIENNE B. Two-dimensional D^- centers[J]. Phys Rev Lett, 1990, 65(18): 1486—1489.
[2] BRODA R, MAYER R H, BEARDEN I G Y. Isomers in tin nuclei from heavy ion collisions and the $\nu_{11/2}$ subshell filling [J]. Phys Rev Lett, 1992, 68(11): 1671—1674.
[3] ASHOORI R C, STORMER H L, WEINER J S, et al. N-electron ground state energies of a quantum dot in magnetic [J]. Phys Rev Lett, 1993, 71(4): 613—616.
[4] ASNOORI R C, STORMER H L, WEINER J S, et al. Single electron capacitance spectroscopy of a few electron box [J]. Physica B, 1993, 189: 117—124.
[5] JOHASON N F. Quantum dots: few-body, low-dimensional systems [J]. J Phys: Condens Matter, 1995, 7(6): 965—989.
[6] MAKSYM P A, CHAKRABORTY T. Quantum dots in a magnetic field: role of electron-electron interactions [J]. Phys Rev Lett, 1990, 65(1): 108—111.
[7] 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.
[8] RUAN W Y. Transform brackets for 2-dimensional harmonic oscillators and its application to few electron quantum dots [J]. J Math Phys, 1996, 37: 3760—3763.
[9] BAO C G, LIN Y X. Deduction of the quantum numbers of low-lying states of 6 nucleon systems based on symmetry [J]. Phys Rev Lett, 1999, 82(1): 61—64.
[10] BAO C G. Structures of low-lying states of a four-electron system in a quantum dot [J]. Physical Review B, 1996, 53(1): 10820—10829. (下转第 30 页)

[6] 谭恩光, 梁传精. 不同农药对海南山蛭的毒力测定及其防治研究[J]. 应用生态学报, 2001, 12(2): 266—268.

[7] 张钧, 谭恩光. 驱避剂对山蛭的驱避作用研究[J]. 中华预防医学杂志, 1982, 16(6): 331—334.

Effect of Human Activities on *Haemadipsa hainana* Population Dynamics in Rubber Plantation of Hainan Island

TAN En guang

(School of Medical Sciences, Sun Yat sen University, Guangzhou 510089, China)

Abstract: The impact of human economic activity on the population dynamics of land leech in rubber plantations in Hainan was studied. The results show that cattle grazing in rubber plantations increased the population number of land leech by 3. 43 folds within one year, while chemical weedings in rubber ledge contour and total area in rubber plantations reduced the population number by 29. 82% and 50. 21%, respectively. Incorporation of leech specific insecticides with weedicides could reduce the land leech population number by 73. 02%. Scientific rubber plantation management in combination with chemical control was quite effective in the manipulation of land leech population in rubber plantations.

Key words: *Haemadipsa hainana*; population nubber; Hainai Island

(上接第 26 页)

Effect of a Magnetic Field and an Impurity on the Ground State for a 2 Dimensional 3 Electron Quantum Dot

LIU Yi min^{1,2}, LI Xiao zhu¹, HUANG Gang ming²

(1. Department of Physics, Shaoguan University, Shaoguan Guangdong 512005, China;
2. Department of Physics, Sun Yat sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: With the method of few body physics, the values of the energy and angular momentum in ground state for a 2 dimensional 3 electron quantum dot are obtained under different magnetic fields and different impurities. They are verified by the analysis of dynamics and symmetry.

Key words: magnetic fields; impurities; quantum dots; the ground state