

摘 要

量子点是低维半导体量子结构,是近年来国内外凝聚态物理研究的一个热点问题,在理论和实验上都受到了广泛关注。本文在有效质量近似条件下,利用少体物理方法,研究处于均匀外磁场中被抛物势约束的二维 N 层单电子垂直耦合量子点系统的基态跃迁。

首先本文在第一章中介绍了低维半导体量子点在国内外的研究现状,背景和意义。并简要介绍了本文的研究方法及研究内容。

第二章具体介绍了谐振子乘积基展开法,推导了二维 N 体系统的 Talmi-Moshinsky 变换系数。然后考虑处于外磁场中被抛物势约束的 N 层单电子垂直耦合量子点系统,即每层量子点仅含一个电子,写出了该系统的哈密顿量。引入质心坐标和 Jacobi 坐标,把质心运动和内部运动分离。利用谐振子乘积基和 Talmi-Moshinsky 变换系数把矩阵元中的多重积分转化为单重积分的乘积,从理论上获得了二维 N 层单电子垂直耦合量子点能量矩阵元的计算公式。

第三章研究双层单电子垂直耦合量子点系统在不同自旋(自旋单态和自旋三态)和不同耦合强度(单个量子点情况、强耦合情况及弱耦合情况)下量子点的能量随外磁场的变化情况。绘出了能量随外磁场变化的函数曲线,获得了耦合强度对幻数角动量和自旋跃迁的影响。

最后在第四章中研究了处于外磁场中四层单电子垂直耦合量子点系统。得到了总自旋分别为 $S=0, 1, 2$ 时,在不同的耦合强度下基态跃迁随外磁场的变化情况。我们发现外磁场的存在会导致基态出现不连续跃迁。量子点的耦合强度和电子之间的库仑相互作用对耦合量子点的基态跃迁有比较大的影响。量子点内部

的关联会导致一系列基态跃迁的消失，而这些基态跃迁在单层量子点中依然存在。

关键词： 耦合量子点 半导体 少体物理

Abstract

Quantum dots (QDs) are semiconductor nanostructure with a three-dimensional confinement of electrons. It has become a hot topics recent years that research on QDs in condensed-matter physics, lots of research in theory and experiment have been carried out. In this paper, within the effective-mass approximation, we studied the ground-state-transition of a vertically coupled four-layer single electron QDs system, which is subjected to a parabolic potential confinement. We studied the system by using method of few-body physics and apply a magnetic field in the z direction

Firstly, we briefly introduced the background and significance of the research on QDs, as well as introduced the theory research methods and concrete contents in this paper.

In chapter two, we introduced the product base of harmonic oscillator and deduced the Talmi-Moshinsky transformation bracket of two-dimensional about N body system. Then consider a N-layer QDs system which was restrained by parabolic confinement in the external magnetic field and each QD contains only one electron, we get the Hamiltonian of the system. For convenience of calculation, we introduce a set of the center of mass (c.m.) coordinate and a set of Jacobi coordinates, The center of mass motion is completely separated from the relative motion in this approach, and the multiple integration can be reduced to single

integrals by means of the Jacobi coordinates and Talmi - Moshinsky transformation coefficients. The matrix elements of the vertically coupled N-layer single electron QDs are obtained.

In chapter three, we studied ground-state energy transitions of a two-electron system in a double-layer QDs in different total spin and intensity of coupling with the change of magnetic field. We draw the correlation energy spectrum as a function of external magnetic field strength and find out the influence of coupling-strength on magic angular momentum and the transition of spin.

Finally, We study a four-electron system in a vertically coupled four-layer quantum dot under a magnetic field by diagonalizing the Hamiltonian matrix exactly. We obtained correlation energy spectrum of the low-lying states as a function of the external magnetic field for three different values of the total spin: (a) $S=0$, (b) $S=1$, (c) $S=2$. We find that discontinuous ground-state energy transitions induced by an external magnetic field. We find that dot-dot distance and electron-electron interaction strongly affect ground-state-transition of the coupled quantum dots. Because ground-state-transition exists in one-layer quantum dot, so we consider that the inter-dot correlation leads to the disappearance of ground-state-transition.

Key words: coupled quantum dot, semiconductors, Few-body physics

广州大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：所提交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律后果由本人承担。

学位论文作者签名：

王亚旭

日期：

2005年6月8日

广州大学学位论文版权使用授权书

本人授权广州大学有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和磁盘，允许论文被查阅和借阅。本人授权广州大学可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。（保密的学位论文在解密后适用本授权书）

学位论文作者签名：

王亚旭

日期：

2005年6月8日

导师签名：

何文方

日期：

2005年6月8日

第一章 绪 论

§ 1.1 研究背景和意义

近年来,随着半导体科学与技术的迅速发展,出现了越来越多的低维量子结构的材料。所谓低维量子结构材料,通常是指除三维体材料之外的二维超晶格、量子阱材料,一维量子线和零维量子点材料。二维超晶格、量子阱材料是指载流子在两个方向(如在 x, y 平面内)上可以自由运动,而在另外一个方向(z)则受到约束,即材料在这个方向的特征尺寸可与电子的德布罗意波长相比拟或更小。在量子线材料中,载流子仅在一个方向可以自由运动,而在另外两个方向则受到约束。在量子点中,载流子在三个维度上都受到势垒约束而不能自由运动。根据量子力学分析,量子点中的载流子在三个维度方向上的能量都是量子化的,其态密度分布为一系列的分立函数,类似于原子光谱性质,因而人们往往也把量子点称之为“人造原子”。控制量子点的几何形状和尺寸可改变其电子结构,实现量子点器件的电学和光学性质的“剪裁”,是目前“能带工程”设计的一个重要组成部分,也是国际研究的前沿热门领域^[1, 2]。由于量子点所具有的量子尺寸(约束)、量子隧穿、库仑阻塞、量子干涉、多体关联和非线性光学效应明显,以及它在微电子、光电子器件,超大规模集成电路,超高密度存储和量子计算机以及生命科学等方面的潜在应用优势,故在低维量子结构的研究中,对载流子施以尽可能多的空间限制,制备零维量子点结构并开发其应用,受到了世界各国科学家普遍重视^[3-5]。

所谓的量子点,并不是我们通常所说的几何意义上的点,而是具有一定大小

的一个区域，只是在三维方向上尺寸均受到纳米级（ $10^{-8}\text{m}-10^{-6}\text{m}$ ）限制，是一个准零维系统。目前，在实验上人们已经可以制备不同形状（盘状^[6]、球状^[1, 6]以及椭圆状等），不同尺寸（几个纳米到几百个纳米）的量子点，其中载流子的数目和量子点的层数可以人为的控制。而且人们已经能够采用多种技术方法制备量子点，如：应变自组装技术，微结构生长与微细加工相结合方法，表面活性剂法，纳米结构的汽-液-固相 (VLS) 生长模式，离子注入法和单原子操作加工技术等^[7, 8]。1995年，G. S. Solomon^[9]等人就已经以GaAs为间隔层，成功的生长了十层InAs材料的垂直线性排列的量子点，而且，每个量子点中电子数目可以精确控制。如今，世界各国的实验工作者和物理学家们都在尝试着利用不同的方法制备各种不同材料的性能优异的量子点。

在基础理论方面，人们对半导体量子点的各种性质也展开了广泛的研究。在1975年，Esaki^[10]等人就第一次提出了量子线和量子点的概念，此后的近三十年来，量子点一直是物理学界研究的热点。人们通过控制，可以使量子点内的电子数从1开始，逐步增加到100左右，从而形成少电子系统，它们遵从量子力学规律，有极强的量子效应，电子与电子之间有强烈的关联。1990年，Maksym^[11]等研究了磁场下量子点中电子的本征能。随后，Ashoori^[12]等获得了量子点基态能随磁场的变化关系，量子点中电子的数目为1至50个。Kainz^[13]等人计算了在强磁场中电子数目达到40个后量子点的基态能。而早在1983年，Laughlin^[14]在研究分数量子霍尔效应时就曾经研究过在磁场作用下受简谐势约束的三个电子二维系统的量子态问题，他研究了最低Landau能级的自旋极化态，指出具有幻数角动量 $L=3K, K=1, 2, \dots$ 的态是基态。Girvin^[15]等分析了包含更多个电子的系统，证明了包含三，四，五个的少电子系统，幻数角动量虽然不同，但它们确实存在。1993

年, Eric Yang^[16]等人研究了量子点的相图, 研究发现, 随着外加磁场强度的变化, 基态量子数L和S会发生跃迁。这个事实明确意味着相变, 也就是电子结构的变化, 因此, 当磁场强度连续变化时, 量子数的跃迁会有可能导致量子点的物理特性(如光学特性, 电子热容等)从一个态变化到另一个态。1995年, 郭江民^[17]等人研究了磁场下包含三个电子的二维量子点的电子性质, 解析的证明了对应于三电子系统基态的幻数角动量的存在起源于量子力学对称性的要求, 同时, 还讨论了磁场强度和约束势对三电子系统基态的影响。1997年, Zhu^[18]研究了量子点的尺寸和形状对二维和三维包含两个电子的量子点系统能谱的影响。1998年, 解文方^[19-21]等人计算了在有效质量近似下, 考虑一被简谐势约束的二维三电子系统, 研究了量子尺寸效应和外磁场的作用, 以及量子盘三电子系统的基态性质和磁场中量子点四电子系统的基态性质。1999年, Ruan^[22]研究了在强磁场中, 电子数 $N=3$ 到8的少电子系统量子点的关联能和基态跃迁情况。2003年, Tavernier^[23]等人研究了处于外磁场中包含四个电子的单个量子点系统的基态, 激发态及相变。

近年来, 对耦合量子点的研究引起了许多科学工作者的关注^[22-27]。耦合量子点又称为人造分子, 由于耦合产生了附加的自由度, 而这个附加的自由度大大的丰富了量子点的物理内容, 在实验方面, 用微加工技术和薄膜处理工艺可以制造垂直耦合量子点。例如, 刻蚀垂直双层量子阱结构^[27], 平行自组织量子点^[28], 这里二维电子受限于宽度小于 $1\ \mu\text{m}$ ^[29]的平面内。这样的样品有极小的隧穿, 但仍然能通过库仑相互作用耦合^[30, 31]。

在理论方面, 1993年Bryant^[35]研究发现在两电子相互作用耦合量子点中的能谱, 电荷密度, 关联函数都随磁场而变化。1996年, Oh.^[36]等人研究了在加磁场

情况下每个量子点含有一个或两个电子时的电子结构。他们对基态的自旋跃迁和能级之间的光跃迁很有兴趣。如1997年, T. Schmidt^[37]等人研究了双层垂直耦合量子点的低温输运情况。1998年, Kapukina和Iozvik^[38]研究了两电子相互作用系统的水平和垂直耦合量子点的能谱在量子点分离, 侧向受限以及加外磁场时的情况, 其中他们把每个量子点看成一个严格的二维系统。1999年, Tokura^[39]等人用精确对角化的方法研究了两垂直耦合量子点的电子态。近几来, Partoens^[40-43]等人研究了双层耦合量子点的基态结构和本征模随量子点之间的距离的变化情况。2003年, Xie^[44]利用少体物理的方法, 研究了处于外磁场中的四电子双层垂直耦合量子点系统, 其中每层量子点包含两个电子, 计算了基态跃迁随外磁场和量子点之间耦合强度的变化关系。然而, 这些工作都集中于研究双层量子点系统, 仅有很少的工作与多层量子点系统有关, 如Benjamin和Johnson^[45]提出了对内层量子点相互作用的假设和近似的方法来研究多层量子点系统。Zhang^[46]等人计算了三层单电子垂直耦合量子点的低激发态能谱。试问当量子点的层数继续增加, 内部量子点之间的相互作用和外磁场会对多层垂直耦合量子点有什么影响呢? 从理论的角度来看, 研究彼此相互独立的多层垂直的耦合量子点有很大的意义。

§ 1.2 理论研究方法

传统的凝聚态物理工作者对半导体量子点系统的研究主要采用Hartree-Fock等方法。但是Hartree-Fock方法忽略了粒子之间的相互关联效应。而对于半导体量子点少电子系统, 电子与电子之间有强烈的关联, 它们遵从量子力学的规律, 有极强的量子效应。显然Hartree-Fock方法已经不再适用, 而必须依赖精确量子

力学的方法处理, 比如精确对角化的方法。在本文的计算中, 将采用精确对角化的方法。对于少电子半导体量子点系统, 我们引入 Jacobi 坐标, 波函数用谐振子乘积基进行展开, 其反对称化采用二维的 Talmi-Moshinsky 变换系数, 然后利用 Jacobi 坐标和 Talmi-Moshinsky 变换系数把多重积分转化为单重积分, 进而求得相应的能量矩阵元, 再采用精确对角化来求得系统的本征能。在具体的计算中, 我们用谐振子的频率 ω 作为变分参数, 选取合适的 ω 使基态能量取最小值, 并根据 ω 的变化对基态能量的影响大小来检验计算结果的准确性。

§ 1.3 研究内容

本文将利用精确对角化的方法来研究处于外磁场中的 N 层单电子垂直耦合量子点系统。对于这样的 N 层量子点系统, 每一层包含的电子数, 束缚势的大小以及层与层之间的距离在实验上都是可以控制的。为了简单起见, 本论文仅考虑简单而又十分有意义的一种情况, 即每一层量子点中仅包含一个被抛物势束缚在 x - y 平面内的电子, 且每一层相邻的量子点在 z 方向上的距离都是相等的, 外磁场均匀垂直的加于每一层上。另外, 不同层之间的电子隧穿忽略不计, 层与层之间仍通过库仑相互作用耦合。其具体研究内容如下。

首先在第二章中, 我们将介绍谐振子乘积基展开法, 推导二维 N 体系统的 Talmi-Moshinsky 变换系数。然后在有效质量近似下, 推导处于外磁场中的二维 N 层单电子垂直耦合量子点的能量矩阵元的理论计算公式。

在第三章中, 我们研究处于均匀外磁场中被抛物势约束的双层单电子垂直耦合量子点系统, 考虑在自旋单态 ($S=0$) 和自旋三态 ($S=1$) 时, 量子点的耦合

强度和电子之间的库仑相互作用及外磁场对量子点系统基态能的影响,找出幻数角动量跃迁变化和自旋振荡规律。

在第四章中,我们研究处于均匀外磁场中被抛物势约束的四层单电子垂直耦合量子点系统。计算总自旋为 $S=0, 1, 2$ 时,分别在强耦合和弱耦合以及单个量子点的情况系统的能量随外磁场的变化规律,找出在自旋一定的情况下量子点的耦合强度和电子之间的库仑相互作用及外磁场对量子点基态跃迁的影响。

参考文献

- [1] D. Yoffe, *Adv. Phys.* 42 (1993) 173.
- [2] 赵凤瑗、张春玲、王占国, 半导体量子点及其应用 (I), *物理* 2004, 33 (4): 249—256
- [3] 王亚东、黄靖云、叶志镇, 半导体量子点的器件应用, *半导体光电*, 2000, 21 (5): 310—313
- [4] 赵凤瑗、张春玲、王占国, 半导体量子点及其应用 (I), *物理* 2004, 33 (4): 249—256
- [5] G. S. Solomon, J. A. Trezza, A. F. Marshall, J. S. Harris Jr., *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 952.
- [6] R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. A Weiner, L. N. Pfeiffer, S. J. Pearton, K. W. West, *Physica B* 189 (1993) 117.
- [7] 彭英才、赵新为, 自组织生长纳米半导体量子点的研究进展, *Ziran Zazhi* Vol. 24 No. 2:74-78
- [8] Li F, Wang J Z, Ye XL *et al.* *J. App. Phys.*, 2001, 89 : 4186
- [9] G. S. Solomon, J. A. Trezza, A. F. Marshall, J. S. Harris Jr., *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 952.
- [10] Esaki L and Tus R, Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors, *IBM J. Res. Dev.* 1975, 14:61-65
- [11] Maksym P A, Chakraborty T. *Phys Rev Lett*, 1990, 65: 108-111.
- [12] Ashoori R C, Stormer H L, Weiner J S, *et al.* *Phys Rev Lett*, 1993, 71: 613.
- [13] Kainz J, Mikhailov S A, Wensaller A, *et al.* *Physica E*, 2002, 12: 888.
- [14] R. B. Laughlin, *Phys. Rev.*, B27(1983)3383

- [15] S. M. Girvin, Phys. Rev., B28(1983)4506
- [16] S-R. Eric. Yang, A. H. Macdonald, and M. D. Johnson Phys. Rev. Lett. 71, (1993)3194
- [17] 郭江民, 阮文英, 刘有廷. 磁场下量子点的电子态. 物理学报. 45 (1) (1996)854
- [18] Jia-Lin Zhu, Zhi-Qiang Li, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno, and Yoshiyuki Kawazoe Phys. Rev. B55(1997),15819.
- [19] 解文方, 陈传誉. 量子点电子态的尺寸效应和磁场的影响. 物理学报. 47 (1) (1998)102
- [20] 解文方, 陈传誉. 量子盘三电子系统的基态性质. 物理学报. 47 (1) (1998)107
- [21] 解文方, 陈传誉. 磁场中量子点四电子系统的基态性质. 物理学报. 47(3)1998, 478
- [22] W Y Ruan, and Ho-Fai Cheung. J. Phys.: Condens. Matter 11 (1999) 435
- [23]. B. Tavernier, E. Anisimovas, F. M. Peeters, B. Szafran, J. Adamowski and S. Bednarek, Phys. Rev. B68(2003). 205305
- [24] Hiroshi Imamura, Peter A. Maksym and Hideo Aoki, Phys. Rev. B59(1999) 5817.
- [25] J. H. Oh, K. J. Chang, G. Ihm, S. J. Lee, Phys. Rev. B 53 (1996) R13264
- [26] B. Partoens, V. A. Schweigert, F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 3990.
- [27] B. Partoens, A. Matulis, F. M. Peeters, Phys. Rev. B 59 (1999) 1617.
- [28] B. Partoens, F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 4433.
- [29] W. F. Xie, P. N. Sun, J. Phys.: Condens. Matter 14 (2002) 7245.
- [30] D. G. Austin, T. Honda, S. Tarucha, Semicond. Sci. Technol. 12 (1997) 631
- [31] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, P. M. Petroff, Appl. Phys. Lett. 65 (1993) 3203.
- [32] U. Merkt, Physica B 189 (1993) 165.
- [33] J. Eisenstein, G. S. Boebinger, L. N. Pfeiffer, et al., Phys. Rev. Lett. 68 (1992)

1383.

[34] G. S. Solomon, J. A. Trezza, A. F. Marshall, J. S. Harris Jr., Phys. Rev. Lett. 76 (1996) 952.

[35] G. W. Bryant, Phys. Rev. B 48 (1993) 8024

[36] J. H. Oh, K. J. Chang, G. Ihm, S. J. Lee, Phys. Rev. B 53 (1996) R13264.

[37] Schmidt T, Haug R J, von Klitzing K, Forster A and Luth H 1997 Phys. Rev. Lett. 78 1544

[38] N. E. Kaputkina, Yu. E. Lozovik, Phys. Solid State 40 (1998) 1929.

[39] Y. Tokura, D. G. Austing, S. Tarucha, J. Phys. : Condens. Matter 11 (1999) 6023.

[40] B. Partoens, V. A. Schweigert, F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 3990.

[41] B. Partoens, A. Matulis, F. M. Peeters, Phys. Rev. B 59 (1999) 1617.

[42] B. Partoens, F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 4433.

[43] B. Partoens, F. M. Peeters, Europhys. Lett. 56 (2001) 86.

[44]. Xie Wenfang, Commun. Theor, Phys. 39(2003), 365

[45] S. C. Benjamin, N. F. Johnson, Phys. Rev. B 51 (1995) 14733.

[46] Z. J. Zhang, B. W. Li, J. G. J. Rao, C. G. Bao, Chin. Phys. Lett. 19(2002) 979.

[43] W. F. Xie, Solid-State Electronics 43 (1999) 2115.

第二章 理论模型和方法

§ 2.1 引言

少体系统是数目不多的粒子组成的系统，包含几个至十几个粒子。由于构成少体系统的微观粒子可以是夸克、核子、电子、原子、分子等粒子，这使得对少体系统的研究成为表面科学、材料科学、粒子物理、核物理、原子分子物理、量子化学、凝聚态物理等学科的基础研究课题之一。少体物理的主要研究任务是探索少体系统的内部结构和内部运动模式，探索粒子间相互作用及性质，探索基本的反应过程等等。由于少体系统可以比较严格地求解，因而有可能得到准确清晰的物理图像，这些图像将有助于进一步理解复杂的多体系统。只有在对少体系统有了深刻的理解，才能在此基础上对复杂的多体系统进行有效的研究，从而逐步完善人们对自然界的认识。量子点中少电子系统是一个比较复杂的少体问题，自由度比较多，采用少体物理方法处理更为方便。通常采用变分法求解薛定谔方程。波函数用一组谐振子乘积基进来展开^[1-4]，其对称化或者反对称化采用广义的Talmi-Moshinsky变换系数完成^[5-11]，计算中求和对某一能壳进行截断，用谐振子参数 ω 作为变分参数，选取合适的 ω 使基态能量取最小值，并根据 ω 的变化对基态能量的影响大小来检验计算结果的准确性。

在本章中，我们将首先介绍谐振子乘积基方法，推导出二维 N 体系统的 Talmi-Moshinsky 变换系数。然后在有效质量的近似下，采用少体物理方法推导多层单电子垂直耦合量子点能量矩阵元表达式。

§ 2.2 谐振子乘积基展开法

考虑由 N 个粒子组成的系统，粒子的坐标为 \vec{r}_i ，相应的质量为 m_i 。则系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_{\vec{r}_i}^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N), \quad (2.1)$$

引入 Jacobi 坐标，每每连接两个子系统的质心，将固定坐标变换成质心坐标 $\vec{R}_{c.m.}$ 和 Jacobi 坐标 $\vec{\xi}_i$ ($i=1, N-1$)，相应的折合质量为 μ_i ，则有

$$H = H_{c.m.} + H_r, \quad (2.2)$$

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{\mu_j} \nabla_{\vec{\xi}_j}^2 + V(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{\xi}_{N-1}), \quad (2.3)$$

$$H_{c.m.} = \frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2, \quad (2.4)$$

这里， $M = \sum_{i=1}^N m_i$ 代表总质量；质心坐标 $\vec{R}_{c.m.} = \sum_{i=1}^N m_i \vec{r}_i / M$ 。 $H_{c.m.}$ 描述质心运动部分， H_r 描述粒子的相对运动部分。

由于 Jacobi 坐标系有多种选取方法，所以下面用 $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ 来标记不同的 Jacobi 坐标系。不同组的 Jacobi 坐标之间有如下线性关系

$$\vec{\xi}_i^{(\alpha)} = \sum_j A_{ij}^{\alpha\beta} \vec{\xi}_j^{(\beta)}, \quad (2.5)$$

可以证明，在线性变换 (2.5) 下有如下不变关系

$$\sum_{i=1}^{N-1} \mu_i^{(\alpha)} \vec{\xi}_i^{(\alpha)2} = \sum_{j=1}^{N-1} \mu_j^{(\beta)} \vec{\xi}_j^{(\beta)2}, \quad (2.6)$$

$$\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{\mu_i^{(\alpha)}} \nabla_{\vec{\xi}_i^{(\alpha)}}^2 = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{\mu_j^{(\beta)}} \nabla_{\vec{\xi}_j^{(\beta)}}^2, \quad (2.7)$$

引入谐振子势，则 (2.3) 式可以重写为

$$H_r = H_0 + U(\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \dots, \bar{\xi}_{N-1}), \quad (2.8)$$

其中

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{\mu_i^{(\alpha)}} \nabla_{\bar{\xi}_i^{(\alpha)}}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 \sum_{i=1}^{N-1} \mu_i^{(\alpha)} \Omega^2 \bar{\xi}_i^{(\alpha)2}, \quad (2.9)$$

$$U(\bar{\xi}_1^{(\alpha)}, \bar{\xi}_2^{(\alpha)}, \dots, \bar{\xi}_{N-1}^{(\alpha)}) = V(\bar{\xi}_1^{(\alpha)}, \bar{\xi}_2^{(\alpha)}, \dots, \bar{\xi}_{N-1}^{(\alpha)}) - \frac{1}{2} \omega^2 \sum_{i=1}^{N-1} \mu_i^{(\alpha)} \Omega^2 \bar{\xi}_i^{(\alpha)2}, \quad (2.10)$$

H_0 在线性变换 (2.5) 下式是不变的, 其本征函数是谐振子波函数的乘积

$$\Phi_q^{(\alpha)} = \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} \phi_{n_i^q \ell_i^q}(\bar{\xi}_i^{(\alpha)}) \right\}_{LM}, \quad (2.11)$$

其中 ℓ_i 是中间耦合角动量, L, M 分别表示总角动量及其在 z 轴上的投影。相应的本征值是

$$E_q = \sum_{i=1}^{N-1} \hbar \omega (2n_i^q + \ell_i^q + \frac{3}{2}), \quad (2.12)$$

由于哈密顿量 H_0 与 Jacobi 坐标选取无关, 一组 Jacobi 坐标下的本征函数可以用另外一组 Jacobi 坐标下的本征函数进行展开。

$$\Phi_q^{(\alpha)} = \sum_p B_{qp}^{\alpha\beta} \Phi_p^{(\beta)}, \quad (2.13)$$

(2.13) 式的求和仅需要对那些与 $\Phi_q^{(\alpha)}$ 简并的态进行, 所以是有限的, 即

$$\sum_{i=1}^{N-1} (2n_i^{(q)} + \ell_i^{(q)}) = \sum_{j=1}^{N-1} (2n_j^{(p)} + \ell_j^{(p)}), \quad (2.14)$$

变换系数 $B_{qp}^{\alpha\beta}$ 即为广义 Talmi-Mashinsky 变换系数。(2.32) 式的哈密顿量 H_r 的本征函数, 可以用 $\Phi_q^{(\alpha)}$ 来展开

$$\Psi = \sum_q C_q \Phi_q^{(\alpha)}, \quad (2.15)$$

在实际计算中, 通常要对求和在某一能壳截断, 谐振子强度参数 ω 作为变分参数, 选取适当的 ω 使基态能量最小。如果 ω 在某一值附近改变时系统的本征能变化很小, 几乎可以忽略, 则说明所取的基矢已足够多, 所以通过改变 ω 来观察

本征能 E 的变换情况可以作为检验计算结果准确度的一个简便手段,当然也可以通过增减基矢的数目来加以判断。

§ 2.3 二维 N 体 Talmi-Moshinsky 变换系数

在求解少体系统的问题时,引入一系列Jacobi坐标,从而使质心的运动和各质点内部的相对运动完全分离,可以利用不同组的Jacobi坐标下的Talmi-Moshinsky变换系数,把矩阵元中多重积分化为单重积分的乘积^[12-14],为我们计算带来极大的方便。

考虑 N 个频率为 ω , 各向同性的二维谐振子, 其系统的哈密顿量可写为

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_{r_i}^2 + \frac{1}{2} m_i \omega^2 r_i^2 \right), \quad (2.16)$$

对于 N 粒子系统, 我们引入质心坐标 $\vec{R}_{c.m.} = \sum_{i=1}^N \frac{m_e}{M} \vec{r}_i$ 和一组Jacobi坐标 $\vec{\rho}_i$, 它们是 $N-1$ 个相互独立的矢量, 每个 $\vec{\rho}_i$ 都表示 N 电子系统中的一个子系统到相应质心的位移。任意两个这样子系统的Jacobi坐标都不会和同一子系统的质心相关, 即所有的Jacobi坐标都是相互独立的。与每一个Jacobi坐标对应的都有一个约化质量 μ_i , μ_i 表示与 $\vec{\rho}_i$ 相对应的团簇的质心质量。(2.16) 式可以分成两个部分

$$H = H_{c.m.} + H_{Rel}, \quad (2.17)$$

其中

$$H_{c.m.} = \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 R_{c.m.}^2, \quad (2.18)$$

表示质心运动部分, $M = Nm_e$, 其中

$$H_{Rel} = \sum_{i=1}^{N-1} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_i} \nabla_{\rho_i}^2 + \frac{1}{2} \mu_i \omega^2 \rho_i^2 \right), \quad (2.19)$$

表示相对运动部分。

引进产生算符

$$\vec{\eta} = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} \left(-\frac{\hbar}{\mu\omega} \nabla_{\vec{\rho}} + \vec{\rho} \right), \quad (2.20)$$

故对于每一个谐振子来说，其哈密顿量可以写为

$$h = \hbar\omega(\vec{\eta} \cdot \vec{\eta}^{\dagger} + 1), \quad (2.21)$$

态函数可以写为

$$|nm\rangle = \prod_{i=1}^{N-1} N_{nm} (\vec{\eta} \cdot \vec{\eta})^n (\eta_x + i\delta_m \eta_y)^{|m|} |0\rangle, \quad (2.22)$$

$$N_{nm} = \sqrt{\frac{1}{2^{2n+|m|}} (|m|+n)! n!}, \quad (2.23)$$

$$\delta_m = \begin{cases} +1 & (m \geq 0) \\ -1 & (m < 0) \end{cases}, \quad (2.24)$$

因此对于相对运动部分 H_{Rel} 的本征态函数可以表示为

$$|K\rangle = \prod_{i=1}^{N-1} N_{nm} (\vec{\eta}_i \cdot \vec{\eta}_i)^{n_i} (\eta_{xi} + i\delta_{m_i} \eta_{yi})^{|m_i|} |0\rangle, \quad (2.25)$$

其相应的本征能量和角动量为

$$E_{[K]} = \hbar\omega \sum_{i=1}^{N-1} (2n_i + |m_i| + 1), \quad (2.26)$$

$$L_{z[K]} = L_{z[K]}, \quad (2.27)$$

其中 $[K]$ 表示一组量子数 $(n_1, n_2, n_3, \dots; m_1, m_2, m_3, \dots)$ 。

又 $\vec{\eta} \cdot \vec{\eta}$ 可以写为

$$\vec{\eta} \cdot \vec{\eta} = (\eta_x + i\eta_y)(\eta_x - i\eta_y), \quad (2.28)$$

则 (2.25) 式可以写为下式形式

$$|K\rangle = \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} N_{n_i m_i} \right\} \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} (\vec{\eta}_{xi} - \vec{\eta}_{yi})^{n_i} \right\} \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} (\vec{\eta}_{xi} + \vec{\eta}_{yi})^{|m_i|} \right\} |0\rangle, \quad (2.29)$$

其中

$$\tilde{n}_i = \begin{cases} n_i & (m_i > 0) \\ n_i + |m_i| & (m_i \leq 0) \end{cases}; \tilde{N}_i = \begin{cases} n_i + |m_i| & (m_i > 0) \\ n_i & (m_i \leq 0) \end{cases}, \quad (2.30)$$

当 $N > 2$ 时, 系统的 Jacobi 坐标不止一组, 不同组之间的 Jacobi 坐标有如下的变换关系:

$$\vec{\rho}_i^{(\alpha)} = \sum_{j=1}^{N-1} a_{ij}^{\alpha\beta} \sqrt{\frac{\mu_j^{(\beta)}}{\mu_j^{(\alpha)}}} \vec{\rho}_j^{(\beta)}, \quad (2.31)$$

$$\nabla_{\vec{\rho}_i^{(\alpha)}} = \sum_{j=1}^{N-1} a_{ij}^{\alpha\beta} \sqrt{\frac{\mu_j^{(\alpha)}}{\mu_j^{(\beta)}}} \nabla_{\vec{\rho}_j^{(\beta)}}, \quad (2.32)$$

$$\sum_{i=1}^{N-1} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_i^{(\alpha)}} \nabla_{\vec{\rho}_i^{(\alpha)}}^2 + \frac{1}{2} \mu_i^{(\alpha)} \omega^2 [\rho_i^{(\alpha)}]^2 \right\} = \sum_{j=1}^{N-1} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_j^{(\beta)}} \nabla_{\vec{\rho}_j^{(\beta)}}^2 + \frac{1}{2} \mu_j^{(\beta)} \omega^2 [\rho_j^{(\beta)}]^2 \right\}, \quad (2.33)$$

所以, 在一组 Jacobi 坐标下的本征态函数可以用另外一组 Jacobi 坐标下的本征态函数进行展开, 如下所示

$$|K\rangle^\alpha = \sum_{K'} B_{[K']}^{[K]}(\alpha\beta) |K'\rangle^\beta, \quad (2.34)$$

其中 $B_{[K']}^{[K]}$ 即为所要求的 Talmi-Moshinsky 变换系数, 且上式满足:

$$E_{[K]} = E_{[K]}, \quad (2.35)$$

$$L_{z[K]} = L_{z[K]}, \quad (2.36)$$

由 (2.28), (2.31), (2.32) 式可知, 算符 $\vec{\eta}$ 满足

$$\vec{\eta}_i^{(\alpha)} = \sum_{j=1}^{N-1} a_{ij}^{\alpha\beta} \vec{\eta}_j^{(\beta)}, \quad (2.37)$$

由 (2.37) 式带入 (2.29) 式可得

$$\begin{aligned} |K\rangle_i^{(\alpha)} = & \sum_{\tilde{n}_1 \tilde{n}_2 \dots \tilde{n}_{N-1}} \sum_{\tilde{N}_1 \tilde{N}_2 \dots \tilde{N}_{N-1}} \left[\prod_{i=1}^{N-1} \frac{N_{n_i m_i}}{N_{n_i' m_i'}} \right] \left[\prod_{i=1}^{N-1} \frac{\tilde{n}_i!}{r_{i1}! r_{i2}! \dots r_{i(N-1)}!} (a_{i1}^{\alpha\beta})^{r_{i1}} (a_{i2}^{\alpha\beta})^{r_{i2}} \dots (a_{i(N-1)}^{\alpha\beta})^{r_{i(N-1)}} \right] \\ & \times \left[\prod_{i=1}^{N-1} \frac{\tilde{N}_i!}{s_{i1}! s_{i2}! \dots s_{i(N-1)}!} (a_{s1}^{\alpha\beta})^{s_{i1}} (a_{s2}^{\alpha\beta})^{s_{i2}} \dots (a_{s(N-1)}^{\alpha\beta})^{s_{i(N-1)}} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \delta_{E[K],E[K']} \delta_{L[K],L[K']} \delta_{\sum_{i=1}^{N-1} r_{ij}, \tilde{n}_i} \delta_{\sum_{i=1}^{N-1} s_{ij}, \tilde{N}_i} \delta_{\sum_{j=1}^{N-1} r_{ji}, \tilde{n}'_i} \delta_{\sum_{j=1}^{N-1} s_{ji}, \tilde{N}'_i} \\
 & \times \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} N_{n'_i m'_i} \right\} \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} (\tilde{n}_{xi}^{(\beta)} - \tilde{n}_{yi}^{(\beta)})^{\tilde{n}'_i} \right\} \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} (\tilde{n}_{xi}^{(\beta)} + \tilde{n}_{yi}^{(\beta)})^{\tilde{N}'_i} \right\} |0\rangle, \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

所以二维 N 体系统的 Talmi-Moshinsky 变换系数表达式为

$$\begin{aligned}
 B_{[K][K']} &= \sum_{\tilde{n}_1 \tilde{n}'_1 \dots \tilde{n}_{N-1} \tilde{n}'_{N-1}} \sum_{\tilde{N}_1 \tilde{N}'_1 \dots \tilde{N}_{N-1} \tilde{N}'_{N-1}} \left[\prod_{i=1}^{N-1} \frac{N_{n_i m_i}}{N_{n'_i m'_i}} \right] \left[\prod_{i=1}^{N-1} \frac{\tilde{n}_i!}{r_{i1}! r_{i2}! \dots r_{i(N-1)}!} (a_{i1}^{\alpha\beta})^{r_{i1}} (a_{i2}^{\alpha\beta})^{r_{i2}} \dots (a_{i(N-1)}^{\alpha\beta})^{r_{i(N-1)}} \right] \\
 & \times \left[\prod_{i=1}^{N-1} \frac{\tilde{N}_i!}{s_{i1}! s_{i2}! \dots s_{i(N-1)}!} (a_{s1}^{\alpha\beta})^{s_{i1}} (a_{s2}^{\alpha\beta})^{s_{i2}} \dots (a_{s(N-1)}^{\alpha\beta})^{s_{i(N-1)}} \right] \\
 & \times \delta_{E[K],E[K']} \delta_{L[K],L[K']} \delta_{\sum_{i=1}^{N-1} r_{ij}, \tilde{n}_i} \delta_{\sum_{i=1}^{N-1} s_{ij}, \tilde{N}_i} \delta_{\sum_{j=1}^{N-1} r_{ji}, \tilde{n}'_i} \delta_{\sum_{j=1}^{N-1} s_{ji}, \tilde{N}'_i}, \quad (2.39)
 \end{aligned}$$

§ 2.4 N 层单电子垂直耦合量子点的基态跃迁的理论公式

量子点中，系统的能量由单粒子能、电子之间的库仑相互作用能和限制能竞争而决定。在外磁场中，只有当场强和角动量 L 以及自旋 S 取特定值时，基态才会发生跃迁^[15]。随着磁场的不断加强，幻数角动量会发生跃迁，导致不连续磁化^[16]下，二维圆形量子点产生侧面束缚势，而且束缚势很好的接近于抛物势，使量子点具有典型的盘状结构^[17,18]。目前理论和实验都集中在单电子盘形量子点电子结构的研究，在此种情况下，量子点的能级主要由侧面电子的动量决定。通过对被抛物势束缚得多电子量子点的基态研究表明，随着电子数目的变化，电容产生振荡，从而形成壳层结构^[19]。在强磁场中，对于 N=5 和 6 的量子点能谱的数值计算结果揭示了量子点的许多精细结构和基态能级的交叉关联，暗示存在结构相变^[20]。实际上，当磁场连续增大时，磁化强度^[21, 22]，电子热容^[23]，振荡强度以及其

他光学性质都会发生一系列不连续变化^[24]。

目前人们已经大量研究了单层量子点和双层量子点的各种物理特性^[25-31]，如电子结构，磁场效应，尺寸效应以及量子点的基态跃迁和激发态。但是对于多层量子点很少涉及，所以研究多层量子点系统显得十分有意义。本节我们就从理论上给出处于均匀外磁场中被抛物势约束的N层单电子垂直耦合量子点的能量矩阵元的计算公式。

考虑一个包含N个电子的N层垂直耦合量子点系统，为简单起见，假设层与层之间的距离d都是相同的，每个量子点仅包一个电子，假设每层束缚电子于x-y平面的外加势都是 $\frac{1}{2}m_e^*\omega_0^2r^2$ ，其中 m_e^* 是电子的有效质量， ω_0 为简谐势的圆频率，外磁场假定沿着z方向，则系统的哈密顿可写成如下形式：

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2m_e^*} (\vec{P}_i + \frac{e}{c} \vec{A}_i)^2 + \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 r_i^2 \right] + V - g^* \mu_B B S_z, \quad (2.40)$$

\vec{A}_i 为矢势， S_z 表示总自旋沿z方向的投影， g^* 是朗德因子， μ_B 是玻尔磁子，取 $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ ，则有

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m_e^*} + \frac{1}{2} m_e^* \omega^2 r_i^2 \right) + V + \frac{1}{2} \omega_c L_z - g^* \mu_B B S_z, \quad (2.41)$$

$$V = \frac{e^2}{\epsilon} \sum_{i < j} \frac{1}{\rho_{ij}}, \quad (2.42)$$

其中 L_z 表示角动量， $\rho_{ij} = \sqrt{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 + [(i-j)d]^2}$ ，电子的频率 $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}/4$ ，

$\omega_c = \frac{eB}{m_e^*}$ ，表示回旋频率。

对于N粒子系统，我们引入质心坐标 $\vec{R}_{c.m.} = \sum_{i=1}^N \frac{m_e^*}{M} \vec{r}_i$ 和一组Jacobi坐标 $\vec{\xi}_i$ ，

它们是N-1个相互独立的矢量，每个 $\vec{\xi}_i$ 都表示N电子系统中的一个子系统到相

应质心的位移。任意两个这样子系统的 Jacobi 标都不会和同一子系统的质心相关，即所有的 Jacobi 坐标都是相互独立的。与每一个 Jacobi 坐标对应的都有一个折合质量 μ_i ， μ_i 表示与 $\vec{\xi}_i$ 相对应的团簇的质心质量。质心的运动和各质点内部的相对运动完全无关，所以利用 Jacobi 坐标和广义 Talmi-Mashinsky 变换系数可以把多重积分转化为单重积分，例如用于处理量子点。但是当电子数目很大时，用二次量子化的方法处理起来更加方便。这里，哈密顿量可以分为两个部分

$$H = H_{c.m.} + H_r, \quad (2.43)$$

其中

$$H_{c.m.} = \frac{P_{c.m.}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 R_{c.m.}^2 + \frac{1}{2} \omega_c L_{c.m.}, \quad (2.44)$$

表示质心运动部分， $M = Nm_c^*$ ，其中

$$H_r = H_0 + V, \quad (2.45)$$

表示相对运动部分，其中

$$H_0 = \sum_{\lambda=1}^{N-1} \left(\frac{P_{\lambda}^2}{2\mu_{\lambda}} + \frac{1}{2} \mu_{\lambda} \omega^2 \xi_{\lambda}^2 \right) + \frac{1}{2} \omega_c L - g^* \mu_B B S_z, \quad (2.46)$$

由于质心运动简单的就像一个二维谐振子，它的解是已知的，所以下面我们仅考虑相对运动部分。

对于一个具有轴对称性的圆形量子点， H_r 的本征态由总角动量 L 和总自旋 S 决定。为了得到相应的本征函数和本征能量，把 H_r 进行对角化，从而相应的波函数就可以转化为 ω 的谐振子乘积基的形式。所以 H_0 的本征函数就可以写成谐振子波函数乘积基形式

$$\Phi_{[K]} = \bar{A} \left\{ \prod_{\lambda=1}^{N-1} \phi_{n_{\lambda} \ell_{\lambda}}(\vec{\xi}_{\lambda}) \chi^s \right\}, \quad (2.47)$$

相应的本征能量为

$$E_{[K]} = \sum_{\lambda=1}^{N-1} (2n_{\lambda} + |\ell_{\lambda}| + 1) \hbar \omega, \quad (2.48)$$

其中 $\phi_{n_{\lambda}}$ 表示频率为 ω ，能量为 $(2n_{\lambda} + |\ell_{\lambda}| + 1)\hbar\omega$ 的二维谐振子波函数， χ^s 表示自旋波函数部分， \bar{A} 表示反对称化算符。波函数的反对称化采用二维 Talmi-Moshinsky 变换系数。需要注意的是由于反对称化使得波函数并不一定正交，因而，在实际计算中应该先进行正交化，使基函数彼此线性独立。我们给出相应的矩阵元

$$\langle \Phi_{[K]} | H_0 | \Phi_{[K']} \rangle = \left\{ \left[\sum_{\lambda=1}^{N-1} (2n_{\lambda} + |\ell_{\lambda}|) + N + 1 \right] \hbar \omega + \frac{1}{2} \omega_c L_z - g^* \mu_B B S_z \right\} \delta_{[K]} \delta_{[K']}, \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{[K]} | V | \Phi_{[K']} \rangle &= \left[\frac{N}{2} \right] U_{[n_i][n_i']}^I \delta_{\ell_i \ell_i'} \prod_{\lambda=2}^{N-1} \delta_{n_{\lambda} n_{\lambda}'} \delta_{\ell_{\lambda} \ell_{\lambda}'} \\ &+ \sum_{[K''] [K'']} B_{[K][K']} B_{[K''] [K']} (U_{n_i' n_i}^{II} - U_{n_i n_i'}^{II}) \delta_{\ell_i' \ell_i} \prod_{\lambda=2}^{N-1} \delta_{n_{\lambda} n_{\lambda}'} \delta_{\ell_{\lambda} \ell_{\lambda}'}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

我们定义下列积分式

$$U_{nn'}^I = \int_0^{\infty} R_{n\ell}(\xi) \frac{e^{-\xi^2}}{\varepsilon \sqrt{\xi^2 + [(i-j)d]^2}} R_{n'\ell}(\xi) \xi d\xi, \quad (2.51)$$

$$U_{nn'}^{II} = \sum_{i>j}^N \int_0^{\infty} R_{n\ell}(\xi) \frac{e^{-\xi^2}}{\varepsilon \sqrt{\xi^2 + [(i-j)d]^2}} R_{n'\ell}(\xi) \xi d\xi, \quad (2.52)$$

R_w 为二维谐振子的径向波函数，相应的矩阵元的计算采用二维的 Talmi-Moshinsky 变换系数 $B_{[K][K']}$ 。

计算的精确度依赖于我们所选择模型的尺寸。因为我们对低激发态的性质很感兴趣，所以我们所选择的尺寸应该足够大以便能够得到正确的结果，但是也不能太大以避免过多的不必要的计算。这方面的提高通过对模型空间维度的扩展来实现。我们每一步计算的结果都要和前一步对照，直到得到期望值为止。

§ 2.5 本章小结

综上所述，本章首先介绍了谐振子乘积基方法，推导了二维 N 体系统的 Talmi-Moshinsky 变换系数。然后在有效质量的近似下，推导出了 N 层单电子垂直耦合量子点能量矩阵元的理论公式。通过本章的理论推导，我们给出了求 N 层垂直耦合量子点能量矩阵元的基本理论框架。

参考文献

- [1] M. Baranger and K. T. R. Davies, Nucl. Phys. 79(1996)403.
- [2] V. Bargmann and M. Moshinsky, Nucl. Phys. 18(1960)697.
- [3] M. Moshinsky, Nucl. Phys. 13(1959)104.
- [4] Igal Talmi, Phys. 20. IX. (1951)185.
- [5] W. Tobocman, Nucl. Phys. A357(1981)293.
- [6] C. G. Bao, Few-Body Methods: Principles & Applications, World Scientific(1986)581.
- [7] W Y Ruan, J. Math. Phys. 37(8) (1996)3760
- [8] W. Y. Ruan and Y. Y. Liu, Phys. Rev. B51 (1995) 7942.
- [9] W. Y. Ruan and Y. Y. Liu, Commun. Theor. Phys. 28 (1997) 373.
- [10] W. F. Xie and C. Y. Chen, Commun. Theor. Phys. 30 (1998) 419.
- [11]. Y. P. Gan, M. Z. Gong, C. E. Wu and C. G. Bao, Computer Physics Communication 34(1985)387
- [12] W. Tobocman, A Generalized Talmi-Moshinsky Transformation For Few-Body and Direct Interaction Matrix Elements, Nuclear Physics A357(1981),293
- [13] Ruan Wenyong and Liu Youyan, Talmi-Moshinsky Transformation For Two-Dimensional System, Commun. Theor. Phys., 28 (1997) ,373
- [14] W. Y. ruan, Transformation Bracket For 2D Harmonic oscillator Functions and Its Application to Few-Electron Quantum Dots, J. Math. Phys., 37 (8) 1996, 3760
- [15] M. A. Kastner, Phys. Today 46 (1993) 24.

- [16] A. D. Yoffe, *Adv. Phys.* 50 (2001) 1.
- [17] A. D. Yoffe, *Adv. Phys.* 50 (2001) 1.
- [18] P. L. McEuen, E. B. Foxman, U. Meirav, M. A. Kastner, et al. *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 1926.
- [19] R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner, et al., *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 613.
- [20] R. Heitz, A. Kallburge, Q. Xie, et al., *Phys. Rev. B* 57 (1998) 9050.
- [21] L. Jacak, J. Krasnyj, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 9069.
- [22] P. Hawrylak, D. Pfannkuche, *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 485.
- [23] W. Y. Ruan, Y. Y. Liu, C. G. Bao, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 7942.
- [24] P. A. Maksym, T. Chakraborty, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 108.
- [25] M. Wagner, U. Merkt, A. V. Chaplik, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 1951.
- [26] J. H. Oh, K. J. Chang, G. Ihm, S. J. Lee, *Phys. Rev. B* 53 (1996) R13264.
- [27] D. G. Austin, T. Honda, S. Tarucha, *Semicond. Sci. Technol.* 12 (1997) 631.
- [28] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* 65 (1993) 3203.
- [29] J. Eisenstein, G. S. Boebinger, L. N. Pfeiffer, et al., *Phys. Rev. Lett.* 68 (1992) 1383.
- [30] N. E. Kaputkina, Yu. E. Lozovik, *Phys. Solid State* 40 (1998) 1929.
- [31] W. F. Xie, *Solid State Electron.* 43 (1999) 2115.
- [32] W. F. Xie, *Solid State Electron.* 43 (1999) 2115.

第三章 双层垂直耦合量子点研究

§ 3.1 引言

随着量子点研究的不断深入,量子点间的耦合所形成的量子点分子,既具有与常规分子类似的特点,又具有区别于常规分子的、新颖的、独特的性质,使其在未来的量子光子计算机中的应用价值越来越明显,因此,近年来,量子点分子的研究无论在理论上还是实验上都引起了人们的高度重视,因而对这种新型的人造分子进行了大量的研究^[1-14]。1998年, Ocsterkamp等人通过测量双量子点分子的微波谱证实了这种人造分子中存在着离子键和共价键^[15],并且,根据两点之间的耦合强度,两个量子点间能够形成离子键或共价键,共价键导致的成键态与反成键态的能量差与二量子点之间的隧穿强度成正比。该系统显示出了单电子器件中可控的相干性,这正是应用于量子点电路的必须条件。1998年, Kapukina和Iozvi^[16]研究了两电子相互作用系统的水平和垂直耦合量子点的能谱在量子点分离,侧向受限以及加外磁场时的情况,他们把每个量子点看成一个严格的二维系统。1999年, Hirosh Imamura^[17]等人用精确对角化的方法研究了双层垂直耦合量子点的基态和激发态的物理特性。2001年,王立民^[18]等人采用推广的LCAO方法和有限元方法计算了两个相同量子点组成的双量子点分子的电子结构。2003年, Xie^[19]利用少体物理的方法,研究了处于外磁场中的四电子双层垂直耦合量子点系统,其中每层量子点包含两个电子,计算了基态跃迁随外磁场和量子点之间距离的变化关系。尤其值得注意的是,对于双层单电子垂直耦合量子点系统,目前在实验上已经观察到了基态跃迁^[20]。而且,还有许多的研究工作对某些材料

的耦合量子点有或者无隧穿效应进行研究的报道^[21-24]，在这些文献中，外加磁场对能谱的影响研究的十分广泛。研究表明，在单层量子点中存在幻数角动量，而在双层耦合量子点中也存在，并对其光学性质也进行了初步研究。

本章采用精确对角化的方法来研究含有两个电子的垂直耦合量子点系统，这样的系统是最简单的既含有量子点内部相互作用又含有量子点之间相互作用的系统。而Harju和Siljamaki^[25]研究了两电子量子点分子（由两个量子点组成，每个量子点包含一个分子），其基态 $S_0=0$ 和 $S_0=1$ 可作为量子计算机的基本信息单元——量子比特，因此，研究两电子双层垂直耦合量子点系统无疑也具有很大的现实意义。

§ 3.2 双层垂直耦合量子点研究

§ 3.2.1 模型和方法

考虑双层单电子量子点系统，假定在每层量子点上所加的约束势都是完全对称的抛物势，其束缚势为 $\frac{1}{2}m_e^* \omega_0^2 r^2$ ，其中， m_e^* 表示每个电子的有效质量， ω_0 表示简斜势的圆频率，量子点在沿着系统的中心轴线方向上是分离的，外磁场沿着Z方向上垂直均匀的加于每一层上。电子之间的相互作用为库仑相互作用，对于这样的系统有： $(H_{space} + H_{spin})\Phi = E\Phi$ 。

$$H_{space} = \frac{1}{2m_e^*} \sum_{i=1}^2 \left[\left(\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}_i \right)^2 + \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 r_i^2 \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon[r_{12}^2 + d^2]^{1/2}}, \quad (3.1)$$

其中 \vec{p}_i 和 \vec{r}_i 分别表示动量和位置坐标， $H_{spin} = -g^* \mu_B B S_z$ ， g^* 是朗德因子， μ_B 是玻尔磁子， S_z 表示总自旋在Z方向上的投影，d表示两个量子点之间的距离。由

于磁场是对称的, 即 $\vec{A} = B(-y, x, 0)/2$, 所以相应的哈密顿量可以写为:

$$H_{space} = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{p_i^2}{2m_e^*} + \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 r_i^2 \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon[r_{12}^2 + d^2]^{1/2}} - \frac{1}{2} \omega_c L, \quad (3.2)$$

其中 $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}/2$ 表示杂化频率, $\omega_c = eB/cm_e^*$ 表示回旋频率, L 表示总角动量在 Z 方向的投影, 为了求出这个多体系统的哈密顿量, 我们引入相对坐标和质心坐标

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad \vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad (3.3)$$

这样 (2) 式中的哈密顿可以分为质心运动部分和相对运动部分, 如下式

$$H_{space} = H_{c.m.} + H_r, \quad (3.4)$$

其中

$$H_{c.m.} = \frac{P^2}{2\mu_R} + \frac{1}{2} \mu_R \omega^2 R^2, \quad (3.5)$$

$$H_r = \frac{p_r^2}{2\mu_r} + \frac{1}{2} \mu_r \omega^2 r^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{r^2 + d^2}} - \frac{1}{2} \omega_c L, \quad (3.6)$$

其中 $\mu_R = 2m_e^*$ 表示总质量, $\mu_r = m_e^*/2$ 表示约化质量, 与 r 相对应。

从而我们可以把波函数写成 $\Phi_{[K]} = \phi_{NM}(\vec{R})\phi_{nm}(\vec{r})$, 其中 $[K]$ 表示一组量子数 $(N, M; n, m)$ 。关于 ϕ_{nm} 的表达式参考文献[30]。质心运动部分的本征值为

$$E(N, M) = (2N + |M| + 1)\hbar\omega, \quad (3.7)$$

相应的主量子数和磁量子数分别为 $N=0, 1, 2, \dots, M=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 。如果不考虑电子之间的相互作用, 我们很容易得到相对运动部分的能量本征值为

$$E_c(n, m) = (2n + |m| + 1)\hbar\omega - \frac{1}{2} \omega_c L, \quad (3.8)$$

相应的主量子数和磁量子数分别为 $n=0, 1, 2, \dots, m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 。

为了求出电子之间有相互作用时相对运动部分的本征能量, 我们来解薛定谔方程

$$H_r [\phi_{nm}(r) \exp(im\varphi)] = E(n, m) [\phi_{nm}(r) \exp(im\varphi)], \quad (3.9)$$

我们很容易发现下面方程满足函数 $\phi_{nm}(r)$

$$\frac{d^2 \phi_{nm}}{d^2 r} + \frac{1}{r} \frac{d \phi_{nm}}{dr} + [E(n, m) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{r^2 + d^2}} - \frac{1}{2} m_c^* \omega^2 r^2 - \frac{m^2}{r^2}] \phi_{nm} = 0, \quad (3.10)$$

我们参考文献[31]用多项式展开法求解。

求解了方程 (10)，则能量值 $E(n, m)$ 就可以得到。为了简便起见，我们定义电子与电子之间的相互作用能 $E_r(n, m)$ 为 $E(n, m)$ 和 $E_0(n, m)$ 之差，即

$$E_r(n, m) = E(n, m) - E_0(n, m) \quad (3.11)$$

所以，Hspace 的能量本征值为质心运动部分的能量和相对运动部分的能量之和。

$$E(n, m; N, M) = [2(n + N) + |m| + |M| + 2] \hbar\omega - \frac{1}{2} \omega_c L + E_r(n, m), \quad (3.12)$$

§ 3.2.2 能谱

下面我们取所有的能量单位为 meV，长度单位为 nm， $m_c^* = 0.067m_e$ ，其中 m_e 表示自由电子的质量， $\epsilon = 12.83$ ， $g^* = -0.44$ 。我们以 CaAs 材料的量子点系统为例，对这种量子点，我们取束缚强度 $\hbar\omega = 1.0\text{meV}$ 比较合适。对于这种材料的盘形量子点，本征态依赖于总角动量 L 和总自旋 S 。

首先我们计算 $L \leq 8$ ， $d = 0\text{nm}$ 时系统的关联能 $E^c = E - 2E(e)$ ，即单个量子点的情况，如图 1 所示，实线对应于 $S = 0$ 时关联能随外磁场的变化情况，虚线对应于 $S = 1$ 时关联能随外磁场的变化情况。总能量由单个粒子的能量和电子之间库仑相互作用能共同决定。由于赛曼能项 $\omega_c L/2$ 的值为负，它正比于磁场强度 B ，在外磁场的作用下会导致关联能随 B 的增大而直线下降，从而使 L 值大的态的能量可能比 L 值小的态的能量更低。所以，随着外磁场的增加，在自旋一定的情况

下，基态的 L 值会较大。因此，随着外磁场的增加，由于前者的能量增加的较快， L 值较小的能量曲线和 L 值较大的能量曲线发生交迭。显然，这种交迭会导致系统的基态会发生跃迁，这种跃迁严格限制在两个固定的角动量之间。从图中我们很容易看出含有两个电子的单个量子点系统处于基态时角动量序列为：当

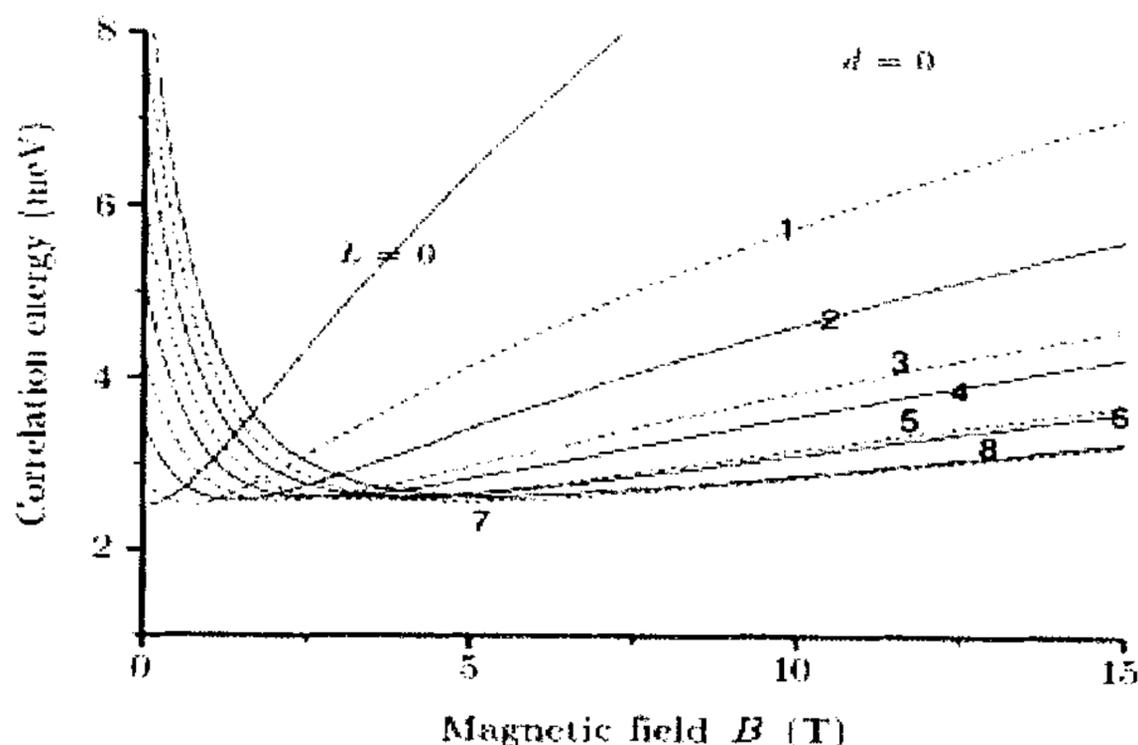


图 3-1 包含两个电子的量子点的关联能谱随外磁场强度的变化的函数曲线。实线对应于总自旋 $S=0$ 的情况，虚线对应于总自旋 $S=1$ 的情况。图形中的数字表示总角动量 L 所对应的态。对 GaAs 材料的量子点，参数取值如下 $\hbar\omega_0 = 1.0\text{meV}$ ， $d = 0\text{nm}$ 。

Fig. 3-1 The correlation energy spectrum of a containing two-electron QD as a function of the external magnetic field strength. The solid lines are associated with $S = 0$ and the dashed lines are associated with $S = 1$. The numbers label the angular momentum of the state. The parameters are taken as appropriate for GaAs; $\hbar\omega_0 = 1.0\text{meV}$ and $d = 0\text{nm}$.

$S=0$ 时， $L=2K$ (K 使整数)；当 $S=1$ 时， $L=2K+1$ 。对这种基态跃迁我们可以理

解为在少电子量子点中电子的动能、电子与电子之间的库仑作用能和 $-\omega_c L/2$ 之间竞争的结果。即在外磁场中，角动量较低的态的动能和库仑能增加的比角动量大的态迅速的多。但是，随外磁场的增加，基态的角动量遵从如下关系：当 $S=0$ （自旋单态）时， $L=0, 2, 4, \dots$ ； $S=1$ （自旋三重态）时， $L=1, 3, 5, \dots$ 。我们就定义这些基态的角动量为幻数角动量^[26-34]。也就是说，双层单电子垂直耦合量子点系统幻数角动量值为偶数（当 $S=0$ ，自旋单态时）或奇数（当 $S=1$ ，自旋三态时），它们符合量子力学对称性的要求。而且我们还发现，在磁场比较低的区域，明显出现自旋单态和自旋三重态的振荡，即还出现了基态的自旋跃迁。而在磁场较高的区域，基态角动量为奇数 $L=7$ 并保持自旋三重态的全极化态，也就是说随着磁场的增加基态跃迁 $L=0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 7$ 的顺序变化。在高磁场区域，自旋三态的能量较低，这也是因为在系统的哈密顿量中存在赛曼能项 $\omega_c L/2$ 的结果。

为观察量子点之间的关联效应，我们取 $d=1.0\text{nm}$ （强耦合情况）。即以双层单电子垂直耦合量子点为例，我们分别绘出 $S=0$ （实线）和 $S=1$ （虚线）时系统的能量随外磁场变化的函数曲线。我们发现在强耦合情况下，基态跃迁规律和含有两个电子的单个量子点完全一样，只是跃迁点向磁场强度大的方向移动。这种情况在理论上可以作如下解释：电子的轨道半径正比于量子点的尺寸和角量子数。随着磁场增大时，量子点的尺寸将变小，电子将跃迁到更高的高轨道上，具有更高角动量来避免排斥作用。而当量子点之间距离 d 增大时，排斥能降低，所以电子在磁场更高的区域才会发生基态轨道跃迁和自旋跃迁。

为了看出量子点之间的距离对关联能的影响，我们观察垂直耦合量子点之间

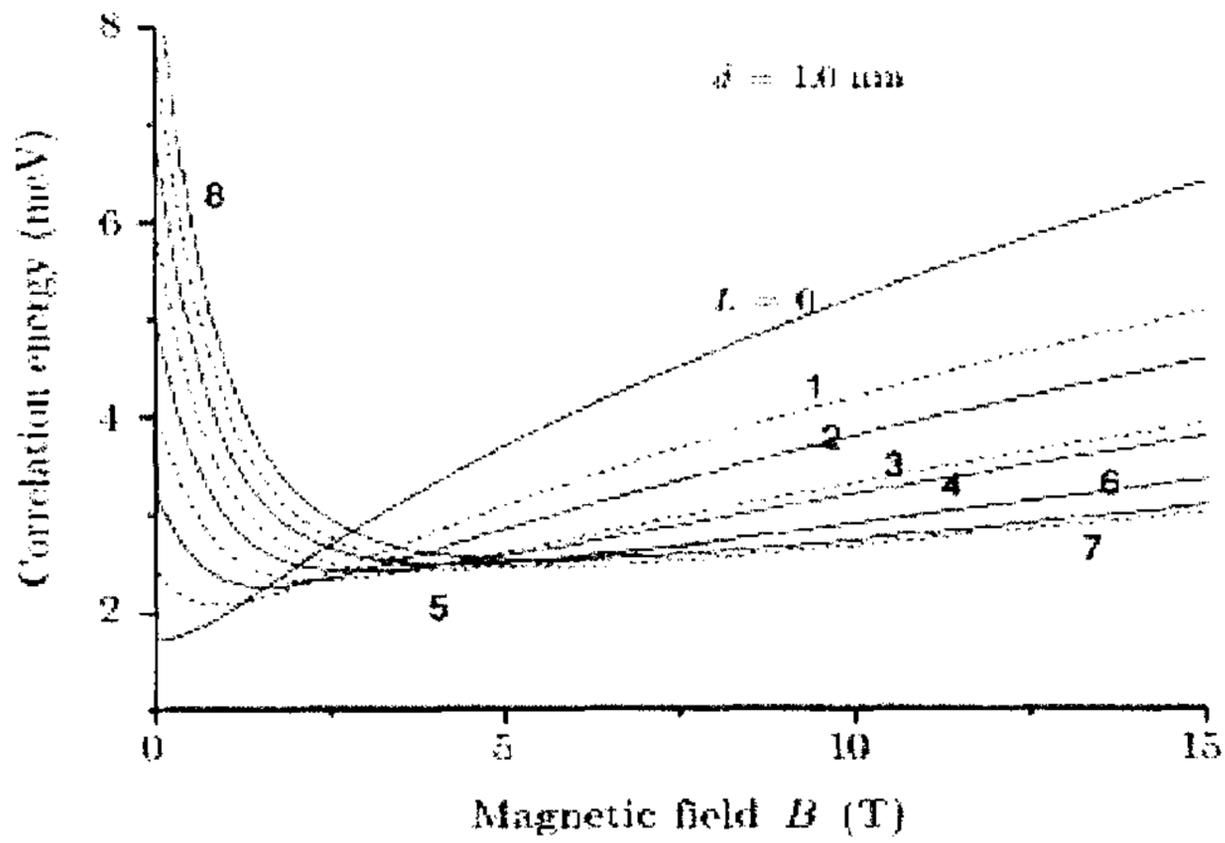


图 3-2 除了 $d=1.0\text{nm}$, 其余同图 3-1 图。

Fig. 3-2 The same as Fig. 3-1, but for $d = 1.0 \text{ nm}$.

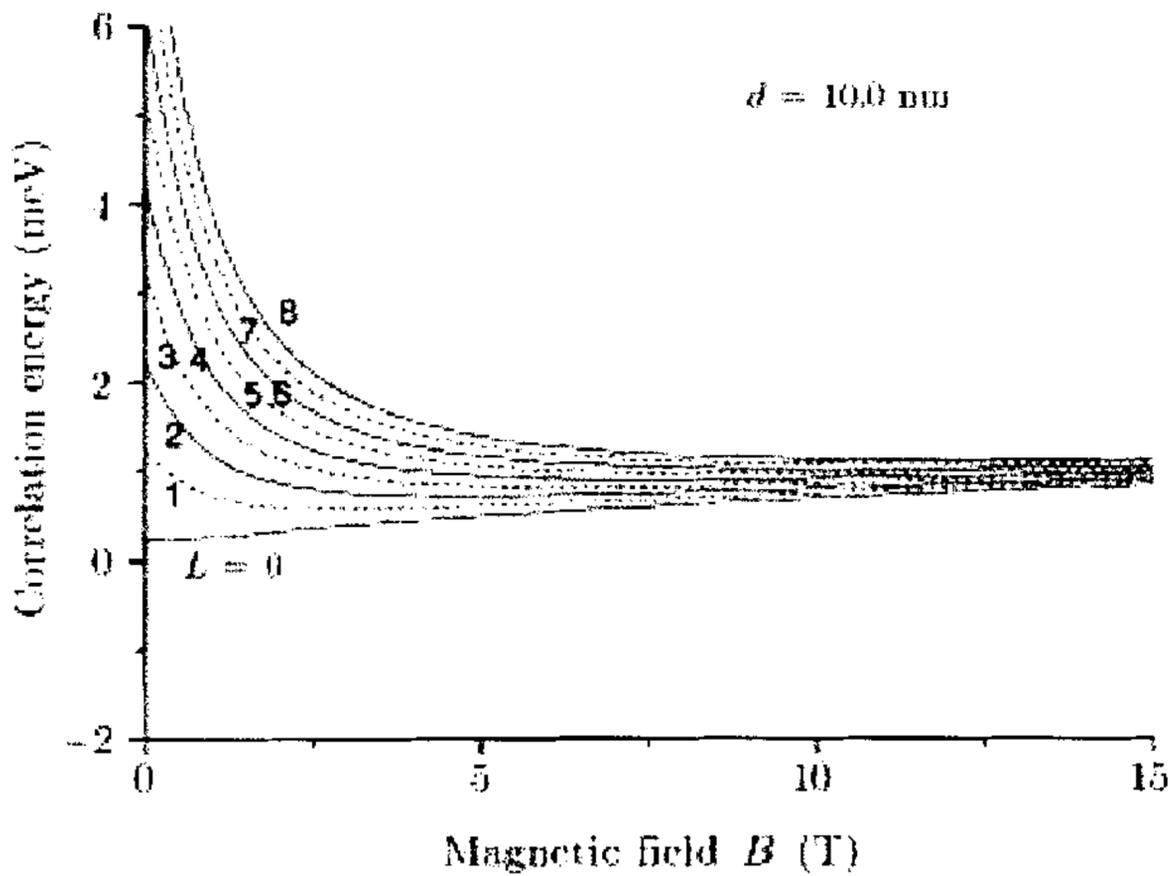


图 3-2 除了 $d=10.0\text{nm}$, 其余同图 3-1 图。

Fig. 3-3 The same as Fig. 3-1, but for $d= 10.0\text{nm}$.

的距离比较大时,即弱耦合情况进行比较时很有意义的。在图 3-3 中,我们绘出了 $d=10.0\text{nm}$, $\hbar\omega=1.0\text{meV}$ 时,能量随外磁场的函数变化关系曲线。从图中我们发现 d 很大时,在 $B\leq 15\text{T}$ 时,没有出现任何基态跃迁,也就是说,在若耦合的情况下,随着外磁场 B 的变化,基态不会跃迁, $L=0$ 的单重态始终为基态。我们知道,根据泡利原理,幻数角动量源于量子限制,而弱耦合情况下这种情况就不存在,故不会出现基态跃迁。

§ 3.3 本章小结

综上所述,本章研究了处于外磁场中被抛物势约束的双层单电子垂直耦合量子点系统的基态跃迁。与单层两电子量子点计较,我们发现在强耦合情况下,除了跃迁点向磁场强度大的方向移动外,其跃迁规律同单层量子点完全一致,即随着外磁场的增加,系统基态的角动量会发生跃迁,这种跃迁严格限制于两个幻数角动量之间;同时还会发生自旋跃迁,在磁场较低的区域,出现自旋单态和自旋三重态的振荡,在高磁场区域,基态角动量连续为奇数并保持自旋三重态的全极化态。而在弱耦合的情况下,基态角动量 L 和自旋都不会随着外磁场的变化而改变, $L=0$ 的自旋单态始终为基态。

参考文献

- [1] T. H. Oosterkamp, T. Fujisawa, W. G. van der Wiel et al., *Nature*, 395 (1998), 873.
- [2] S. Tarucha, T. Honda, D. G. Austing et al. *Physica E3* (1998), 112.
- [3] T. Fujisawa, T. H. Oosterkamp, W. G. vander, Wiel, B. W. Broer, R. Aguado, S. Tarucha, L. P. Kouwenhoven, *Science*, 2825 (1998), 932.
- [4] Naoki Fujita, Fujio Wakaya, Yeshihiko Yuba, Kenji Gamo, *Physica*, E7 (2000), 420.
- [5] Yasuhito Asano, *Phys. Rev.*, B58(1998), I414.
- [6] S. M. Maurer, S. R. Patel, C. M. Marcus, *Phys. Rev., Lett.*, 83 (1999), 1403.
- [7] X. H. Xu, H. Jiang, X. Sun, H. Q. Lin, *Physica*, B79 (2000), 214.
- [8] Teemu Pohjola et al, *Physica* B284—288(2000), 1762.
- [9] Schmidt T, Haug R J, von Klitzing K, Forster A and Luth H 1997 *Phys. Rev. Lett.* 78 1544.
- [10] Bing-Lin Gu, Xi-kun Wang, *Solid State Physics* (Press of tsinghua University, Beijing, 1989), P. 137 (in Chinese) [顾秉林, 王喜坤, 固体物理学, 清华大学出版社 (1989) P. 137].
- [11] P. L. George, *Automatic Mesh Gereneration—Application To Finite Elecment Methods*, WILEY, 1991.
- [12] F. M. Peeters et al. *Phys. Rev. B* 53 (1996) 1468.
- [13] R. P. Rice, X. Shu, S. D. Dar Maetal, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 2017
- [14] Ji-Lin Zhu et al *Phys. Rev. B* 41 (1990) 6001.
- [15] T. H. Oosterkamp, T. Fujisawa, W. G. van der Wiel et al., *Nature*, 395 (1998), 873.

- [16] N. E. Kaputkina, Yu. E. Lozovik, *Phys. Solid State* 40 (1998) 1929.
- [17] Hiroshi Imamura, Peter A. Maksym and Hideo Aoki, *Phys. Rev.* B59(1999) 5817.
- [18] 王立民, 罗莹和马本堃, 双量子点分子的电子结构. *物理学报* 50 (2) (2001) 0278.
- [19] Xie Wenfang, *Commun. Theor. Phys.* 39(2003), 365.
- [20] [11] R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* 71(1993) 613.
- [21] H. Imamura, P. Maksym, and H. Aoki, *Phys. Rev.* B59(1999) 5817.
- [22] S. C. Benjamin and N. F. Johnson, *Phys. Rev.* B51 (1995) 14733.
- [23] Y. Tokura, D. G. Austing, and S. Tarucha, *J. Phys. Condens. Matter.* 11 (1999) 6023.
- [24] XIE Wen-Fang, *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)* 39 (2003) 365.
- [25] Harju A, Siljamaki S, Nieminen R M. *Phys. Rev. B*, 2003, 67: 205312.
- [26] C. G. Bao, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 3475.
- [27] W. F. Xie and C. Y. Chen, *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)* 33 (2000) 349.
- [28] W. F. Xie, *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)* 39 (2003) 477.
- [29] W. F. Xie and C. Y. Chen, *Phys. Rev. Lett.* A245 (1998) 297.
- [30] W. Y. Ruan, Q. Li, G. S. Chen, H. P. He and Y. B. Pan, *Chin. Phys. Lett.* 17 (2000) 10.
- [31] W. F. Xie, *Chin. Phys. Lett.* 16 (1999) 53.
- [32] W. F. Xie and C. Y. Chen, *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)* 32 (1999) 545.
- [33] W. Y. Ruan and Y. Y. Liu, *Phys. Rev.* B51 (1995) 7942.
- [34] C. G. Bao, W. Y. Ruan and Y. Y. Liu, *Phys. Rev.* B53 (1996) 10820.

第四章 四层垂直耦合量子点的基态跃迁

§ 4.1 引言

对单个量子点及双层量子点系统,无论在实验上还是理论上,人们对其各种物理特性都进行了广泛深入的研究^[1-35],但对多层量子点的情况却很少涉及到。Benjamin和Johnson^[36]给出了对内层量子点相互作用的假设和近似的方法来研究多层量子点系统。2002年,Zhang^[37]等人计算了三层单电子垂直耦合量子点的低激发态能谱。2003年,Xie^[38]用少体物理的方法研究了四电子双层垂直耦合量子点系统。但对四层单电子垂直耦合量子点系统,没有发现相关文献,具有很大的研究意义。本章将重点研究四层垂直耦合量子点系统基态跃迁以及量子点间耦合强度和电子与电子之间的库仑相互作用对基态跃迁的影响。

§ 4.2 理论公式推导

对四层量子点系统,每层上电子的数目,束缚势的强度和相邻量子点之间的距离在实验上都是能够精确控制的。为简便起见,我们仅考虑每层量子点仅含有一个电子,外加束缚势为 $\frac{1}{2}m_e^*\omega_0^2r^2$,且所有电子被束缚在x-y平面内,外加均匀磁场垂直于量子点平面(x-y平面)。其中 m_e^* 表示每个电子的有效质量, ω_0 表示简谐势的圆频率,电子之间通过库仑相互作用耦合。在有效质量近似下,该量子点系统的哈密顿量可写为

$$H = \sum_{i=1}^4 \left[\frac{1}{2m_e^*} (\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}_i)^2 + \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 r_i^2 \right] + V_1 + V_2 - g^* \mu_B B S_z, \quad (4.1)$$

$$V_1 = \frac{e}{4\pi\epsilon} \left[\frac{1}{\sqrt{r_{12}^2 + d^2}} + \frac{1}{\sqrt{r_{34}^2 + d^2}} \right], \quad (4.2)$$

$$V_2 = \frac{e}{4\pi\epsilon} \left[\frac{1}{\sqrt{r_{13}^2 + 4d^2}} + \frac{1}{\sqrt{r_{24}^2 + 4d^2}} + \frac{1}{\sqrt{r_{14}^2 + 9d^2}} + \frac{1}{\sqrt{r_{23}^2 + d^2}} \right], \quad (4.3)$$

其中 \vec{p}_i , \vec{r}_i 和 \vec{A}_i 分别表示第 i 个电子的动量, 位矢和矢势, V_1 和 V_2 表示量子点内部电子之间的库仑相互作用势。 g^* 是朗德因子, μ_B 是玻耳磁子, S_z 表示总自旋沿 Z 方向上的投影, d 表示两个量子点之间的距离, 取 $\vec{A} = \mathbf{B}(-y, x, 0)/2$, 则系统的哈密顿量可以写为

$$H = \sum_{i=1}^4 \left(\frac{p_i^2}{2m_e^*} + \frac{1}{2} m_e^* \omega^2 r_i^2 \right) + V_1 + V_2 + \frac{1}{2} \omega_c L_z - g^* \mu_B B S_z, \quad (4.4)$$

这里, 杂化频率 $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}/2$, $\omega_c = eB/cm_e^*$ 表示回旋频率, L_z 表示总轨道角动量沿 Z 方向上的分量。

为了简化方程(4-4), 我们引入质心坐标和一组 Jacobi 坐标: $\vec{R}_{c.m.} = \sum_{i=1}^4 \vec{r}_i/4$,

$\vec{\xi}_1 = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/2$, $\vec{\xi}_2 = (\vec{r}_3 - \vec{r}_4)/2$, $\vec{\xi}_3 = (\vec{r}_3 + \vec{r}_4 - \vec{r}_1 - \vec{r}_2)/2$ 。则系统的质心运动和相对运动可以分离为

$$H = H_{c.m.} + H_r, \quad (4.5)$$

其中

$$H_{c.m.} = \frac{P_{c.m.}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 R_{c.m.}^2, \quad (4.6)$$

为质心运动的哈密顿量, $M = 4m_e^*$ 表示质心质量。系统内部运动的哈密顿量为

$$H_r = H_0 + V_1 + V_2, \quad (4.7)$$

$$H_0 = \sum_{v=1}^3 \left(\frac{p_v^2}{2\mu_v} + \frac{1}{2} \mu_v \omega^2 \xi_v^2 \right) + \frac{1}{2} \omega_c L_z - g^* \mu_B B S_z, \quad (4.8)$$

其中 $\mu_1 = \mu_2 = m_e^*/2$, $\mu_3 = m_e^*$ 。

对盘形量子点, H_r 的本征值和总轨道角动量 L 和总自旋 S 有关。为了求得相应的本征函数和本征能量, 把 H_r 进行对角化, 相应的波函数用二维谐振子乘积基进行展开 $\{\Phi_{[K]} = \bar{A}[\phi_{n_1 \ell_1}(\vec{\xi}_1)\phi_{n_2 \ell_2}(\vec{\xi}_2)\phi_{n_3 \ell_3}(\vec{\xi}_3)\chi^S]_L\}$, $[K]$ 表示一组量子数 $(n_1, \ell_1, n_2, \ell_2, n_3, \ell_3)$, $\chi^S = \left[(\eta(1) \eta(2))_{S_{12}} (\eta(3) \eta(4))_{S_{34}} \right]_S$, 其中 $\phi_{n\ell}(\vec{\xi})$ 表示频率为 ω , 能量为 $(2n_\lambda + |\ell_\lambda| + 1)\hbar\omega$ 的二维谐振子波函数, χ^S 表示自旋波函数部分, \bar{A} 是反对称化算符。 $\eta(i)$ 是第 i 个粒子的自旋波函数, S_{12} 是第一个电子和第二个电子的自旋, S_{34} 是第三和第四个电子的自旋。 H_r 的矩阵元可以表示为

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{[K]} | H_0 | \Phi_{[K']} \rangle &= \{ [2(n_1 + n_2 + n_3) + |\ell_1| + |\ell_2| + |\ell_3| + 3] \hbar\omega \\ &+ \frac{1}{2} \omega_c L_z - g^* \mu_B B S_z \} \delta_{[K][K']}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{[K]} | V_1 | \Phi_{[K']} \rangle &= U_{n_1 n_1'}^I \delta_{\ell_1 \ell_1'} \delta_{n_2 n_2'} \delta_{\ell_2 \ell_2'} \delta_{n_3 n_3'} \delta_{\ell_3 \ell_3'} \\ &+ U_{n_2 n_2'}^I \delta_{n_1 n_1'} \delta_{\ell_1 \ell_1'} \delta_{\ell_2 \ell_2'} \delta_{n_3 n_3'} \delta_{\ell_3 \ell_3'}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{[K]} | V_2 | \Phi_{[K']} \rangle &= \sum_{[K][K']} B_{[K][K']} B_{[K']}[K'] [(U_{n_1 n_1'}^{II} + U_{n_1 n_1'}^{III}) \delta_{\ell_1 \ell_1'} \delta_{n_2 n_2'} \delta_{\ell_2 \ell_2'} \delta_{n_3 n_3'} \delta_{\ell_3 \ell_3'} \\ &+ (U_{n_2 n_2'}^{II} + U_{n_2 n_2'}^I) \delta_{n_1 n_1'} \delta_{\ell_1 \ell_1'} \delta_{\ell_2 \ell_2'} \delta_{n_3 n_3'} \delta_{\ell_3 \ell_3'}], \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$U_{n, n'}^I = \int_0^\infty R_{n\ell}(\xi) \frac{e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{\xi^2 + d^2}} R_{n'\ell'}(\xi) \xi d\xi, \quad (4.12)$$

$$U_{n, n'}^{II} = \int_0^\infty R_{n\ell}(\xi) \frac{e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{\xi^2 + 4d^2}} R_{n'\ell'}(\xi) \xi d\xi, \quad (4.13)$$

$$U_{n, n'}^{III} = \int_0^\infty R_{n\ell}(\xi) \frac{e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{\xi^2 + 9d^2}} R_{n'\ell'}(\xi) \xi d\xi, \quad (4.14)$$

$$B_{[K][K']} = \int \Phi_{[K]}(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \vec{\xi}_3) \Phi_{[K']}(\vec{\xi}_1', \vec{\xi}_2', \vec{\xi}_3') d\vec{\xi}_1 d\vec{\xi}_2 d\vec{\xi}_3, \quad (4.15)$$

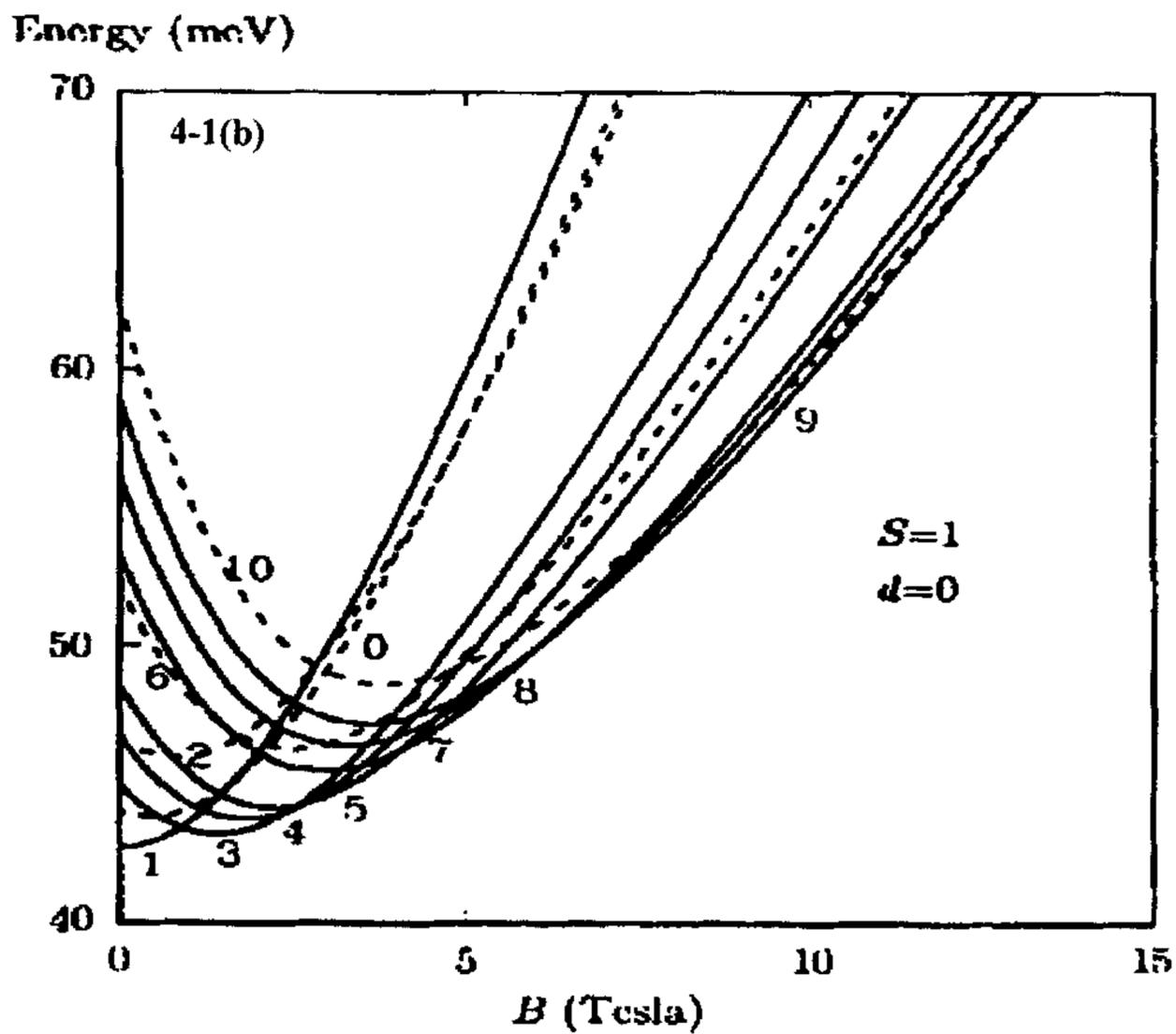
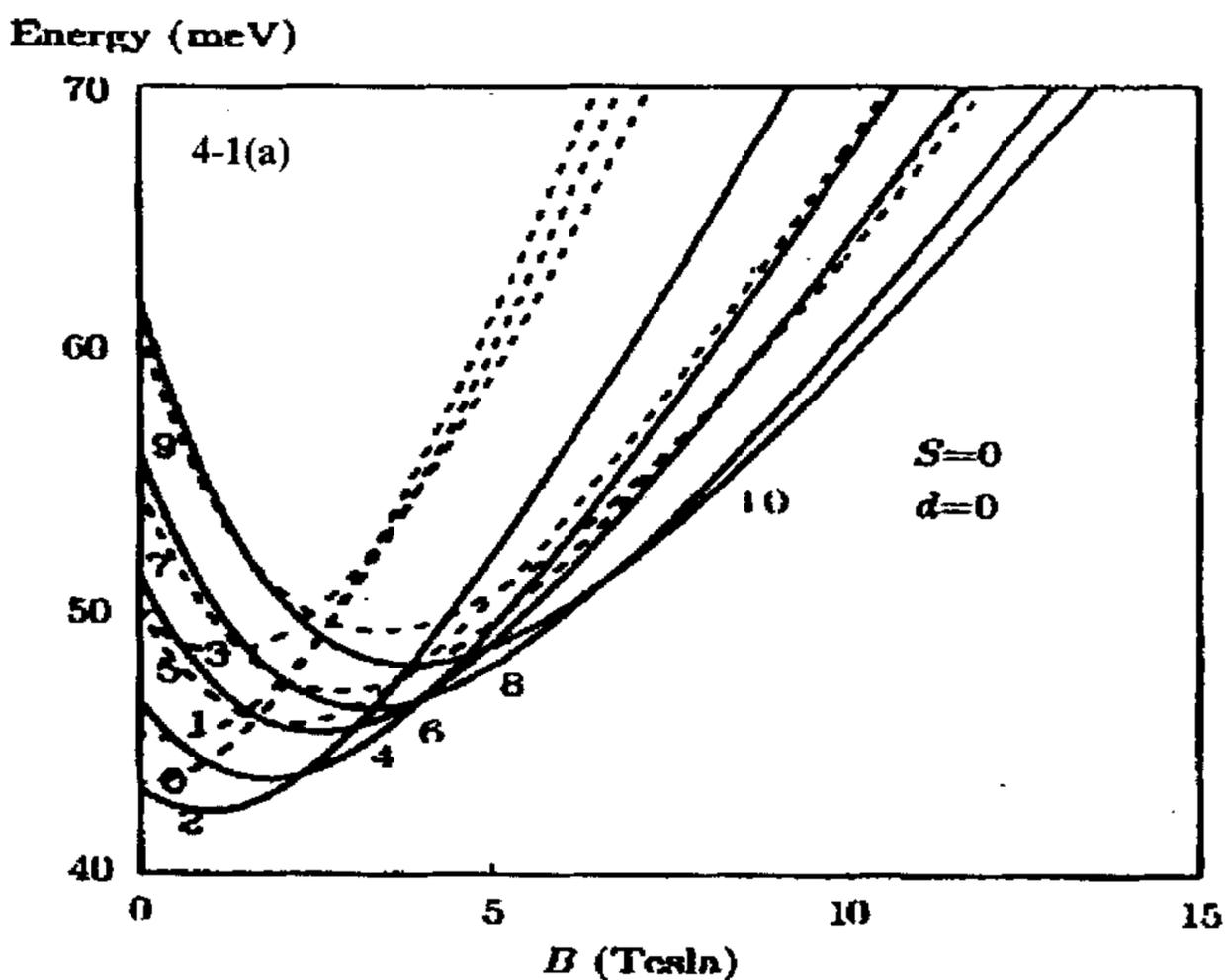
其中 $R_{n\ell}(\xi)$ 为二维谐振子的径向波函数, $B_{[K][K']}$ 是系统中任意两组不同的 Jacobi 坐标下谐振子波函数之间的 Talmi-Moshinsky 变换系数, 仅当 $\Phi_{[K]}(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \vec{\xi}_3)$ 和 $\Phi_{[K']}(\vec{\xi}_1', \vec{\xi}_2', \vec{\xi}_3')$ 的本征能和本征角动量完全相同时 $B_{[K][K']}$ 才为零。定义一组规范的

Jacobi 坐标, $\{\bar{\xi}_1', \bar{\xi}_2', \bar{\xi}_3'\}$ 为: $\bar{\xi}_1' = (\bar{r}_1 - \bar{r}_3)/2$, $\bar{\xi}_2' = (\bar{r}_2 - \bar{r}_4)/2$, $\bar{\xi}_3' = (\bar{r}_2 + \bar{r}_4 - \bar{r}_1 - \bar{r}_3)/2$ 。

计算结果的精确度和所选取的模型的空间尺寸有很大关系, 由于我们只是对低激发态的有关性质感兴趣, 所以我们选择的尺寸不是很大, 从而能够给我们的数值计算带来方便, 也不会太小以确保其准确性。做到这一点就需要逐步的扩大模型的空间尺寸, 把每一步的计算结果都和前一步进行比较, 直到得到满意的值为止。

§ 4.3 数值计算结果

取所有能量单位为 meV, 长度单位为 nm, 我们对 CaAs 材料的量子点进行了具体的数值计算, 参数选取同第三章除了 $\hbar\omega_0 = 3.6 \text{ meV}$, 目前有几个实验已经制备出了这样的量子点。首先, 我们计算在 $d=0 \text{ nm}$ 时, 即单个量子点的能量随外磁场的变化情况 (如图 1)。量子点的基态能由单电子能, 电子与电子之间的库仑相互作用能以及塞曼能 $\omega_c L_z/2$ 共同竞争的结果。由于存在负值项 $\omega_c L_z/2$, 它正比于磁场强度 B , 于是它在哈密顿量中会产生一个线性减小能量的作用, 从而使得 L 较大的能级有可能低于 L 较小的能级, 因而, 随着磁场的增大, L 较小的态的能量随着 B 的增大而增加的比 L 较大的态的能量增加的快, 对给定自旋结构的 L 较大的态有可能是能量最低的态, 这样就会发生角动量的基态跃迁, 而这种跃迁严格限制在两个幻数角动量为 L 的态之间。从图 4-1 中我们很容易看出四电子系统的单层量子点幻数序列为当 $S=0$ 时, L 为偶数; 当 $S=1$ 时, $L=$ 奇数和 $4K$ ($K=1, 2, 3, \dots$); 当 $S=2$ 时, $L=4K+2$ ($K=0, 1, 2, \dots$)。在这个系统中幻数角动量的起源很容易被解释源于量子力学对称性。



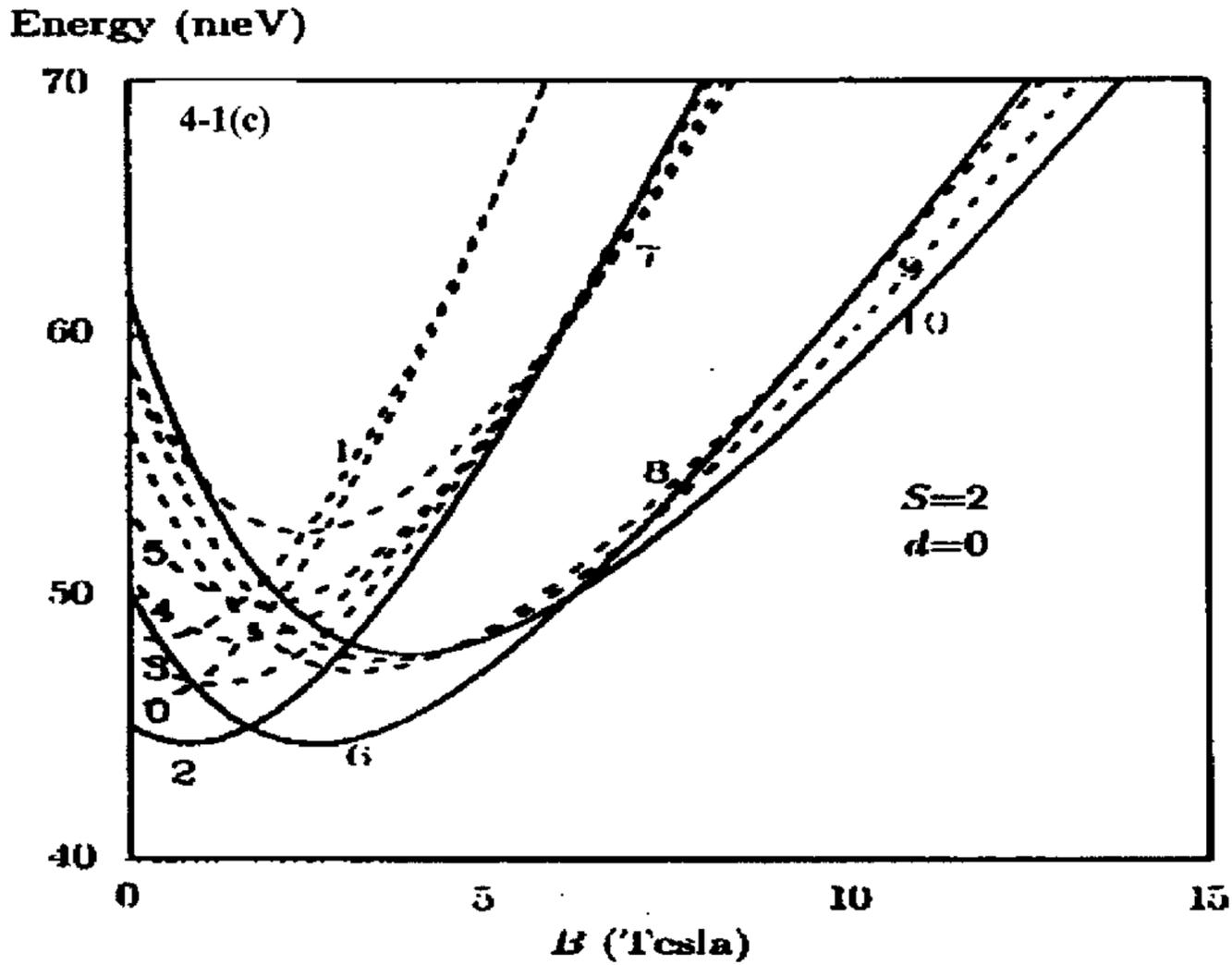
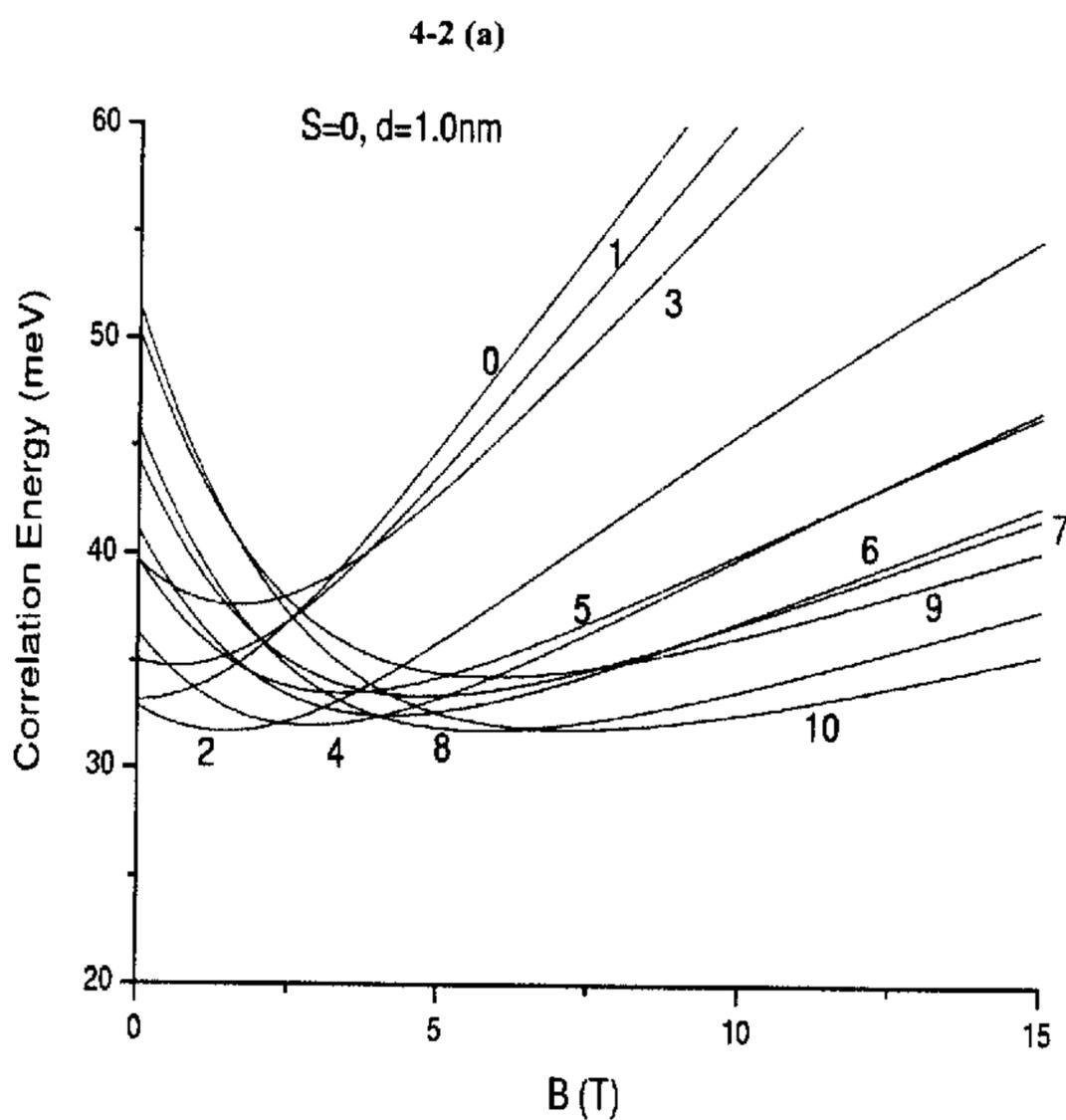
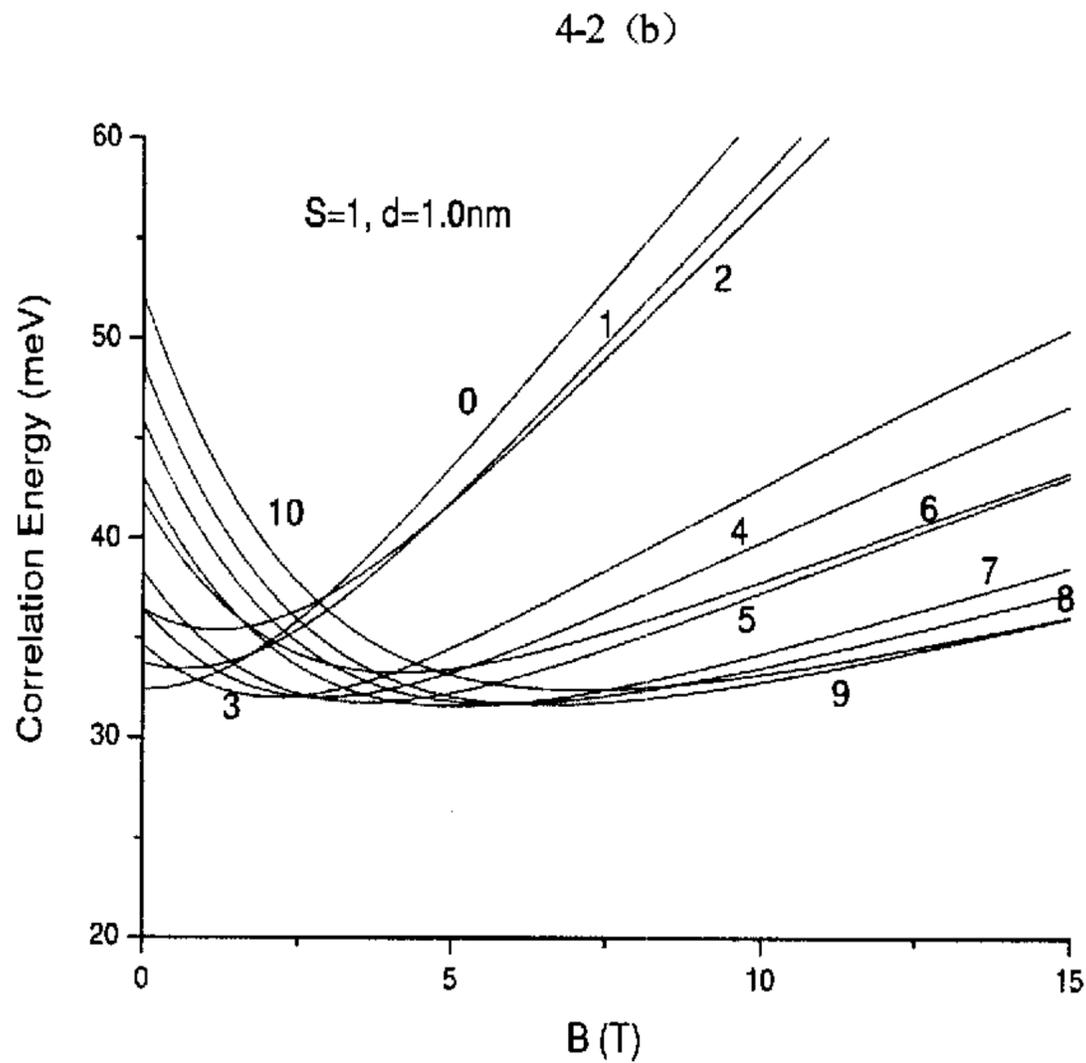


图 4-1 当总自旋分别取：(a) $S=0$ ，(b) $S=1$ ，(c) $S=2$ ，每层含有一个单电子的四层垂直耦合量子点的关联能随外磁场的变化函数图像。图形中的数字表示总角动量 L 所对应的态。其中实线对应于幻数角动量 L ，虚线对应于非幻数角动量 L 。对 GaAs 材料的量子点，参数取值如下 $\hbar\omega_0 = 3.6\text{meV}$ ， $d = 0\text{nm}$ 。

Fig. 4-1 Correlation energy levels of a vertically coupled four-layer single electron QD versus external magnetic fields, (a) $S=0$, (b) $S=1$, (c) $S=2$. The numbers in the figures label the total angular momentum L of the states. The solid lines are associated with magic numbers L , the dashed lines are associated with non-magic numbers. Parameters are taken appropriate for GaAs, $\hbar\omega_0 = 3.6\text{meV}$ and $d=0\text{nm}$.

为了直观的看出量子点内部的关联效应，我们取 $d=1.0\text{nm}$ ，也就是强耦合的情况，然后绘出总自旋分别取：(a) $S=0$ ，(b) $S=1$ ，(c) $S=2$ 时 $L \leq 10$ 的能量随外磁场的函数变化关系曲线如 4-2 所示。同样系统的总能量由单粒子的能量和电子内部之间的库仑相互作用能以及 $\omega_c L_z/2$ 共同竞争的结果。由于存在负值项 $\omega_c L_z/2$ ，使得 L 值大的态的能量反而比 L 值小的态的能量低。因此，随着外磁场的增加，会出现基态跃迁，不过，这种跃迁严格限制于两个幻数角动量之间。





从图 4-2 我们很容易看出四层单电子量子点的幻数序列为：当 $S=0$ 时， $L=2, 4, 8, 10$ ；当 $S=1$ 时， $L=0, 3, 4, 5, 7, 9$ ；当 $S=2$ 时， $L=2, 6, 10$ 。把上面的结果同 4-1 中含四个电子的单个量子点的情形进行比较，我们发现当 $S=0$ 时，幻数角动量 $L=0$ 和 6 消失了；在 $S=1$ 时，基态跃迁出现了新的幻数序列，显然不同于含四个电子的单个量子点。而幻数角动量的起源可以解释为由于泡利不相容原来引起的量子限制^[37]。另外一方面，我们发现当 $S=2$ 时，从定性上来分析，基态跃迁的规律和四电子单个量子点的规律完全^[38, 39]，只是随着量子点之间的距离的增加，即耦合强度的减弱，基态跃迁将会在磁场更高的位置才发生。对这种情况，可以作如下解释：电子的轨道半径正比于量子点的尺寸和角量子数^[40]，随着磁场增大，量子点的尺寸将变小，电子将跃迁到更高的高轨道上，具有

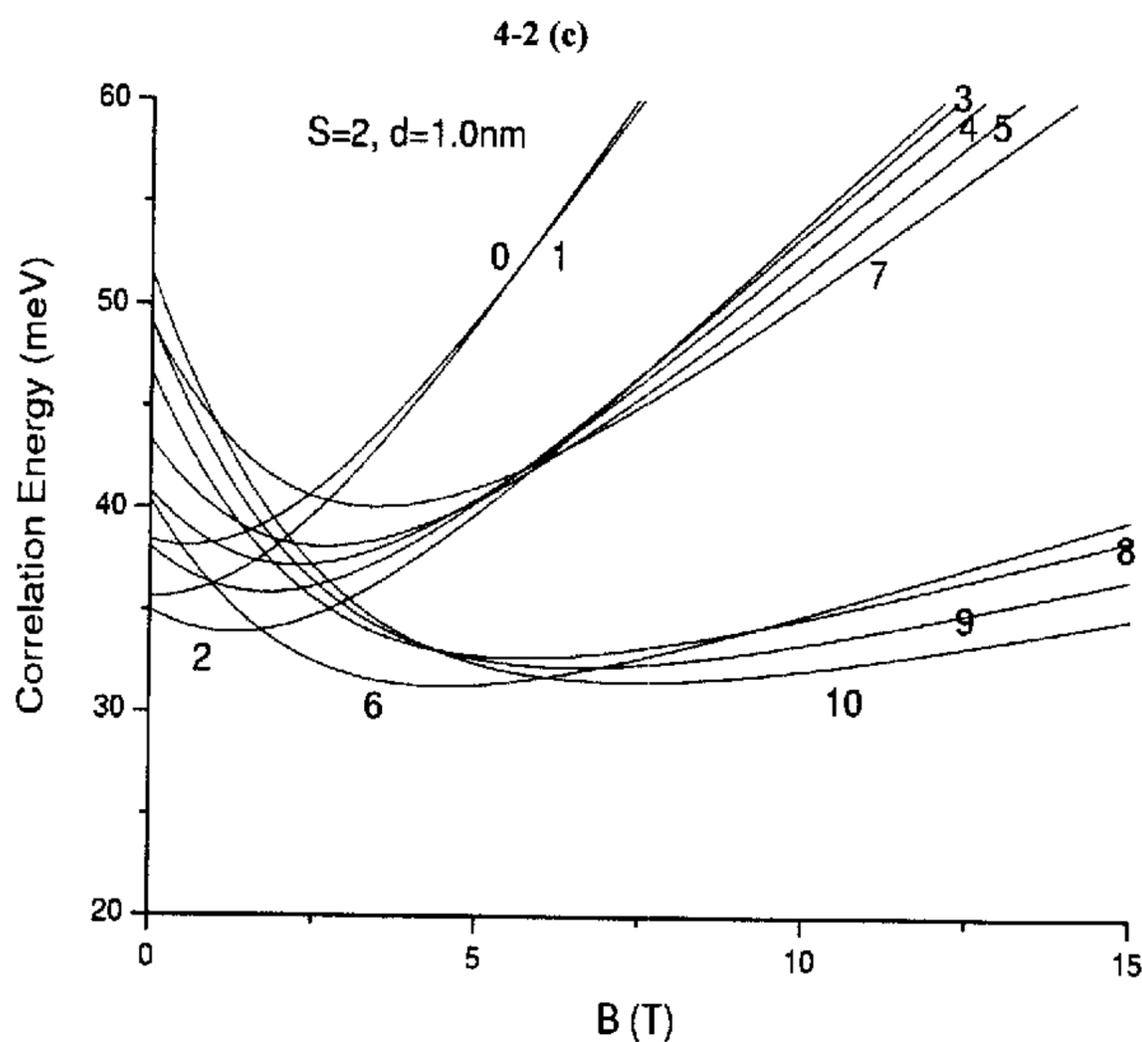


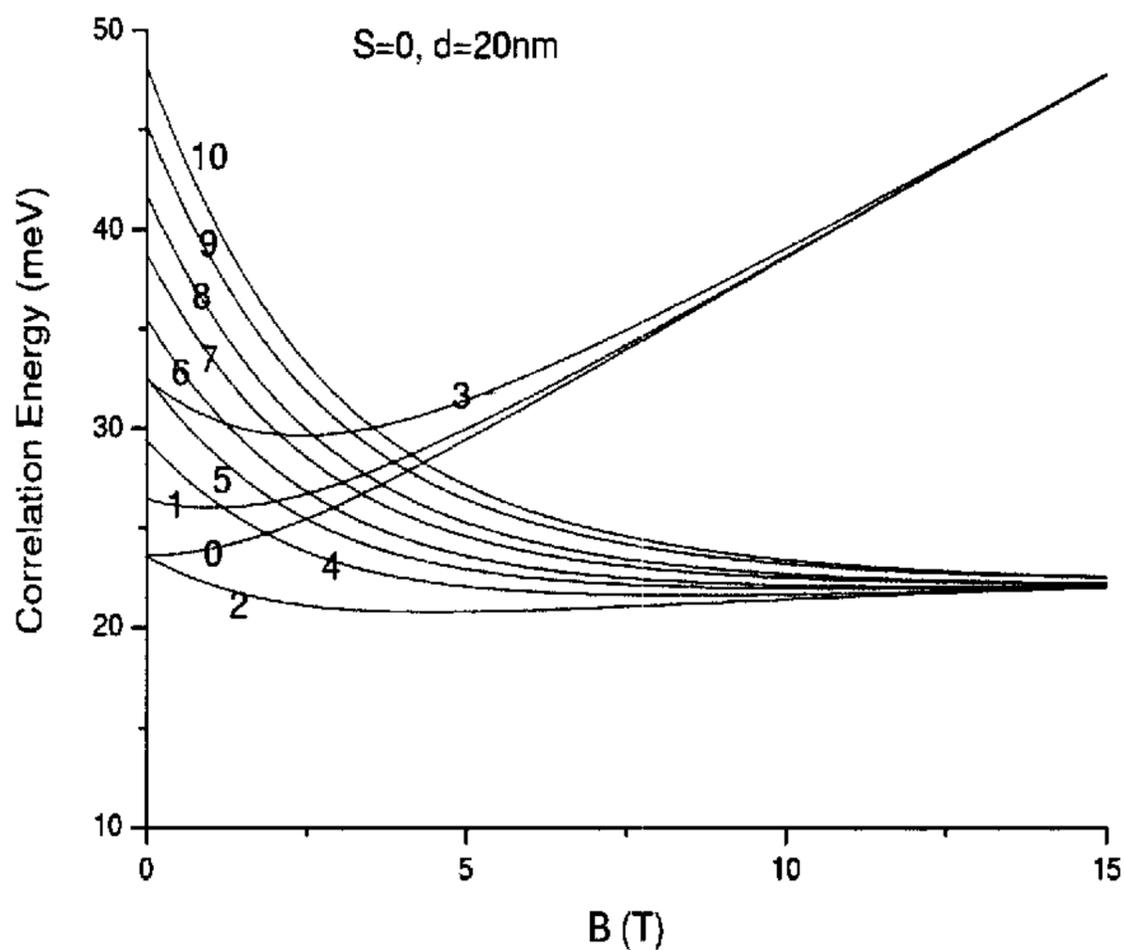
图 4-2 当总自旋分别取：(a) $S=0$ ，(b) $S=1$ ，(c) $S=2$ ，每层含有一个单电子的四层垂直耦合量子点的关联能随外磁场的变化函数图像。图形中的数字表示总角动量 L 所对应的态。对 GaAs 材料的量子点，参数取值如下 $\hbar\omega_0 = 3.6\text{meV}$ ， $d = 0\text{nm}$ 。

Fig. 4-2 Correlation energy levels of a vertically coupled four-layer single electron QD versus external magnetic fields, (a) $S=0$, (b) $S=1$, (c) $S=2$. The numbers in the figures label the total angular momentum L of the states. Parameters are taken appropriate for GaAs, $\hbar\omega_0 = 3.6\text{meV}$ and $d=0\text{nm}$.

更高角量子数。当量子点之间距离 d 增大时，即耦合强度减弱，排斥能降低，所以随着磁场增加，电子的基态跃迁点向磁场强度大的方向移动。

为了进一步观察量子点内部的关联效应，我们取 $d=20.0\text{nm}$ ，也就是弱耦合的情况，取 $\hbar\omega_0 = 3.6\text{meV}$ ，然后绘出总自旋分别取：(a) $S=0$ ，(b) $S=1$ ，(c) $S=2$ 时系统的能量随外磁场的函数变化关系曲线如 4-3 所示。从图 4-3 我们很显然看书在弱耦合的情况下，基态跃迁出现了新的幻数序列，即当 $S=0$ 时， $L=2$ ，当 $S=1$ 时， $L=0, 3$ ，当 $S=2$ 时， $L=2, 6$ ，这完全不同于图 4-1 中四电子单个量子点情况和图 4-1 中强耦合的情况，许多的幻数已经消失了。另外一方面，

4-3 (a)



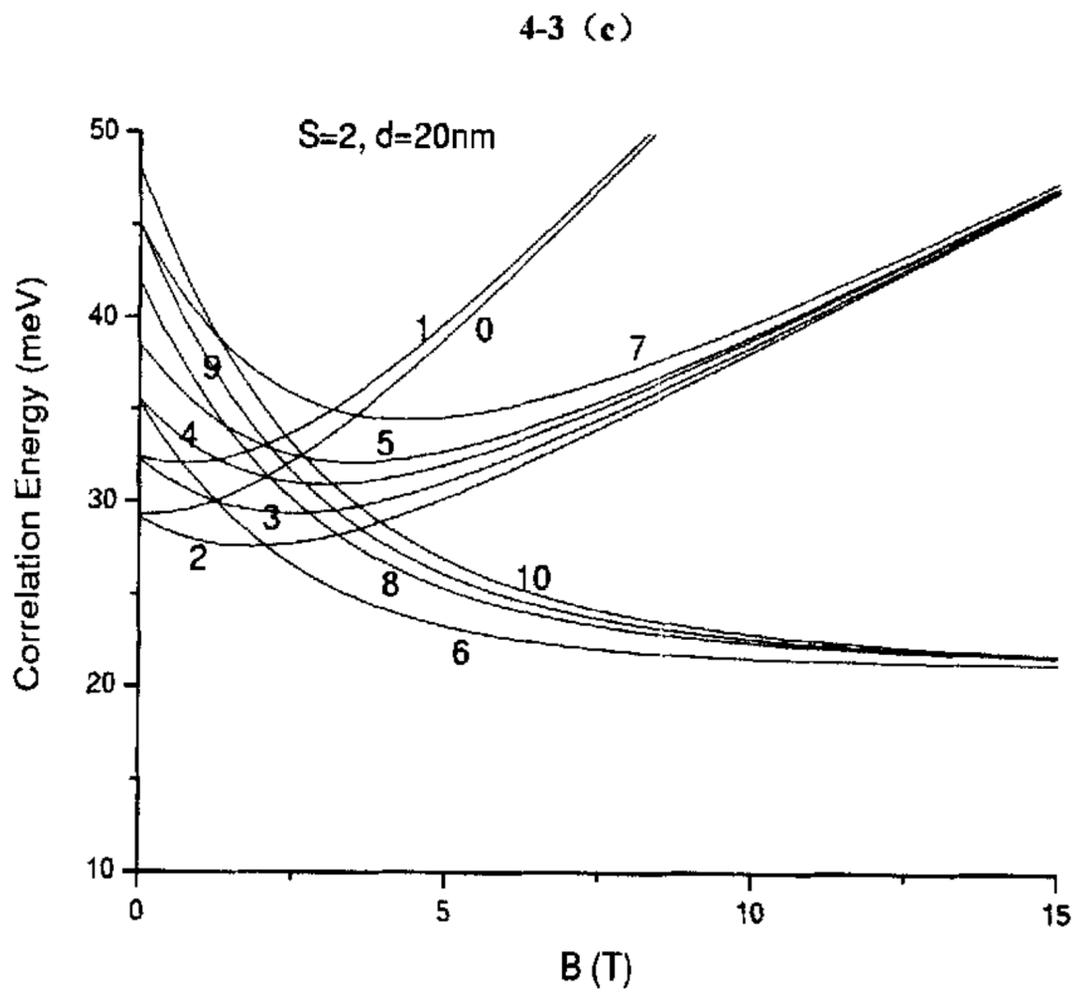
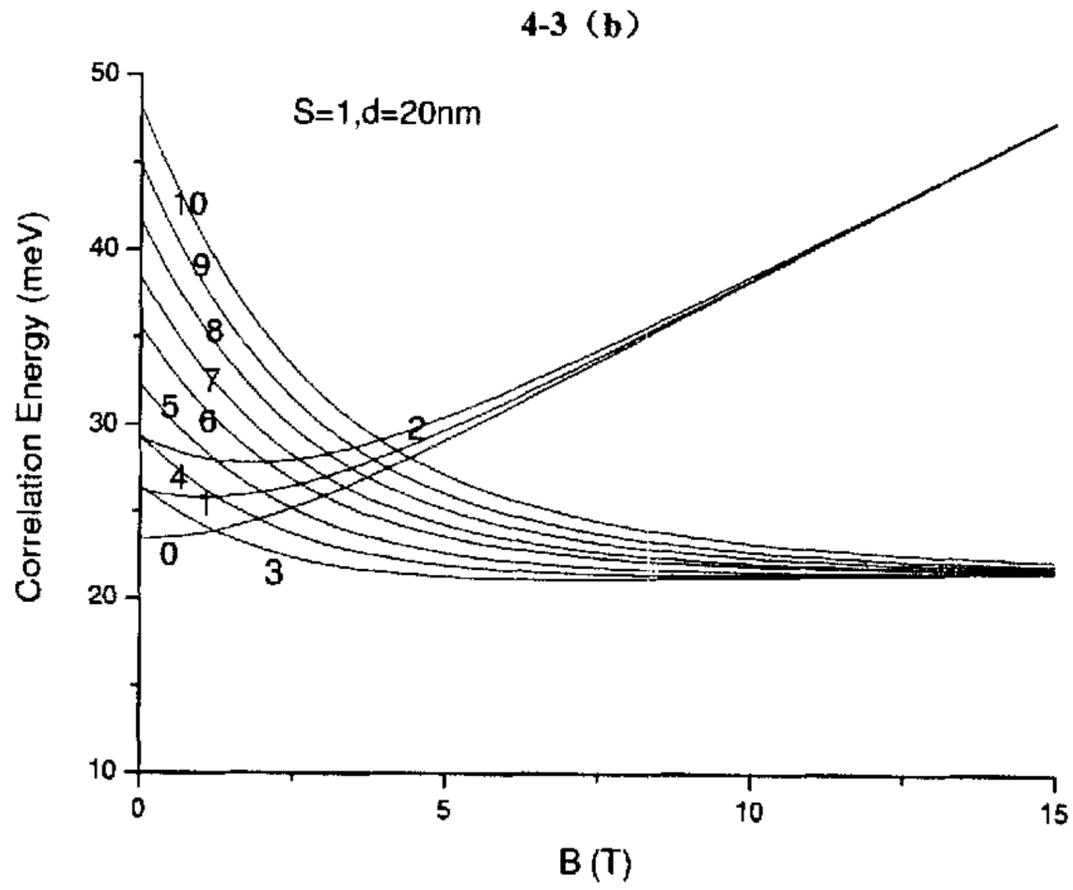


图 4-3 除了 $d=20.0\text{nm}$, 其余同 4-2 图。

Fig. 4-3 The same as Fig. 4-2 except for $d=20.0\text{nm}$.

这个结果也不同于四电子双层耦合量子点的情况^[23]。

§ 4.3 本章小结

本章我们采用精确对角化的方法计算了处于外磁场中且被抛物势束缚的四层单电子垂直耦合量子点系统。计算结果表明量子点之间的耦合强度和电子与电子之间的库仑相互作用对耦合量子点的能量有比较大的影响。而量子点内部的关联会导致一系列基态跃迁可能消失，而这些基态跃迁在单层量子点中依然存在。对于以上所有分析，我们都是假定束缚势为抛物势，系统的质心运动和相对运动是可以分离的前提下进行计算的。那么当约束势不是抛物势，质心运动和相对运动无法分离的情况，幻数序列仍然遵循上述规律的，关于这一点我们可以参考文献[39]。

参考文献

- [1] M. A. Kastner, *Phys. Today* 46 (1993) 24.
- [2] R. C. Ashoori, *Nature* 379 (1996) 413.
- [3] P. A. Maksym and T. Chakraborty Tapash, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 108.
- [4] C. G. Bao, W. Y. Ruan, and Y. Y. Liu, *Phys. Rev. B* 53 (1996) 10820.
- [5] Pawl Hawrylak and Daniela Pfannkuche, *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 485.
- [6] S. Tarucha, D.G. Austing, T. Honda, R.J. van der Hage, and L.P. Kouwenhoven, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3613.
- [7] T.H. Oosterkamp, J.W. Janssen, L.P. Kouwenhoven, D.G. Austing, T. Honda and S. Tarucha, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 2931.
- [8] M. Pi, A. Emperador, M. Barranco, F. Garcias, K. Muraki, S. Tarucha, and D.G. Austing, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 066801
- [9] 解文方, 陈传誉. 量子点电子态的尺寸效应和磁场的影响. *物理学报*. 47 (1) (1998) 102
- [10] 解文方, 陈传誉. 磁场中量子点四电子系统的基态性质. *物理学报*. 47(3) (1998), 478
- [11] Schmidt T, Haug R J, von Klitzing K, Forster A and Luth H 1997 *Phys. Rev. Lett.* 78 1544
- [12] S. R. Eric Yang, A. H. MacDonald and M. D. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 3194.
- [13] V. Halonen, P. Pietilainen, and T. Chakraborty, *Europhys. Lett.* 33 (1996) 377.
- [14] P. A. Maksym and T. Chakraborty, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 1947
- [15] W. F. Xie and P. N. Sun, *J. Phys. : Condensed Matter* 14, 7245 (2002)

- [16] G. Cipriani, M. Rosa-Clot and S. Taddei. *Phys. Rev. B* 61 (2000) 7536
- [17] Hiroshi Imamura, Peter A. Maksym and Hideo Aoki. *Phys. Rev. B* 59 (1999) 5817
- [18] F.R. Waugh, M.J. Berry, D.J. Mar, R.M. Westervalt, K.L. Campman, and A.C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995) 705.
- [19] T. Schmidt, R.J. haug, K.v. Klitzing, A. Forster, and H. Luth, *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997) 1544.
- [20] G. Schedelbeck et al, *Science* 278 (1997) 1792.
- [21] R.H. Blick, D. Pfannkuche, R.J. haug, H.v. Klitzing, and K. Eberl, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 4032.
- [22] A. Lorke, and Richard J. Luyken, *Physica B* 256-258 (1998) 424.
- [23] M. Brodsky, N.B. Zhitenev, R.C. Ashoori, L.N. Pfeiffer, and K.W. West, *Phys. Rev. Lett.* 85 (2000) 2356.
- [24] M. Bayer et al, *Science* 291 (1998) 451.
- [25] C. Y. Fong, H. Zhong and B. M. Klein, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 7466.
- [26] J. H. Oh, K. J. Chang, G. Ihm, et al, *Phys. Rev. B* 53 (1996) R13264.
- [27] W. F. Xie and P. N. Sun, *J. Phys. : Condensed Matter* 14, 7245 (2002).
- [28] XIE Wen-Fang, *Commun. Theor. Phys.* 39 (2003) 365.
- [29] J. H. Oh, K. J. Chang, G. Ihm, et al, *Phys. Rev. B* 53 (1996) R13264.
- [30] G. W. Bryant, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 8024.
- [31] N. E. Kaputkina and Yu E. Lozovik, *Phys. Solid State* 40 (1998) 1929.
- [32] Y. Tokura, D. G. Austing and S. Tarucha, *J. Phys. : Condens. Matter* 11 (1999) 6023.
- [33] W. F. Xie, *Solid-State Electronics* 43 (1999) 2115.

- [34] C. G. Bao, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 3475.
- [35] XIE Wen-Fang, Commun. Theor. Phys. 35 (2001) 335.
- [36] S. C. Benjamin and N. F. Johnson, Phys. Rev. B 51 (1995) 14733.
- [37] Z. J. Zhang, B. W. Li, J. G. Rao and C. G. Bao Chin. Phys. Lett. 19 (2002) 979.
- [38] XIE Wen-Fang, Commun. Theor. Phys. 39 (2003) 365.
- [39] W. F. Xie, Solid-State Electronics 43 (1999) 2115.

第五章 总结

综合前面内容所述, 本文采用了少体物理的方法, 在有效质量近似下, 波函数采用谐振子乘积基进行展开, 其反对称化采用二维的 Talmi-Moshinsky 变换系数, 通过精确对角化来计算多层垂直耦合量子点的基态能谱。其具体研究内容分述如下。

(1) 首先介绍谐振子乘积基展开法并推导了二维 N 体系统的 Talmi-Moshinsky 变换系数。然后研究处于外磁场中被抛物势约束的 N 层量子点系统, 且每层量子点仅含一个电子, 写出了该系统的哈密顿量。然后引入质心坐标和 Jacobi 坐标, 把质心运动和内部运动分离。由于质心运动简单的就像一个二维谐振子, 其解是已知的, 我们仅讨论内部运动, 其波函数用谐振子乘积基进行展开, 反对称化采用二维的 Talmi-Moshinsky 变换系数, 再利用谐振子乘积基和 Talmi-Moshinsky 变换系数, 从理论上得到了 N 层垂直耦合量子点的能量矩阵元表达式。

(2) 具体研究了处于外磁场中被抛物势束缚于 x - y 平面内的双层单电子垂直耦合量子点系统。分别计算并绘出总自旋 $S=0$ (自旋单态) 和 $S=1$ (自旋三重态) 时在量子点之间的距离分别取 $d=0\text{nm}$ (单个量子点情况), 1.0nm (强耦合情况), 10.0nm (弱耦合情况) 时系统的能量随外磁场的函数变化关系曲线。我们发现, 含有两个电子的单个量子点 (即 $d=0$ 时) 系统的幻数序列为: 当 $S=0$ 时, $L=2K$ (K 使整数); 当 $S=1$ 时, $L=2K+1$ 。同时我们还发现, 在低磁场区域, 明显出现自旋单态和自旋三重态的振荡, 即出现自旋跃迁; 而在高磁场区域, 基态角动量为奇数 $L=7$ 并保持自旋三重态的全极化态。当 $d=1.0\text{nm}$ (强耦

合情况)时,我们发现基态跃迁和含有两个电子的单个量子点完全一样,只是跃迁点向磁场强度大的方向移动。但是当 $d=10.0\text{nm}$ (弱耦合情况)时,在 $B\leq 15\text{T}$ 时,没有出现基态跃迁,也就是说,在弱耦合的情况下,随着外磁场 B 的变化,基态不会跃迁, $L=0$ 的自旋单态始终为基态。

(3) 研究了处于均匀外磁场中被抛物势束缚的四层单电子垂直耦合量子点系统,绘出了不同自旋(自旋分别为 $S=0, 1, 2,$)、不同耦合强度下(单个量子点情况、强耦合情况和弱耦合情况)系统的基态能谱随外磁场的函数变化曲线。通过比较这些函数曲线,我们发现外磁场的存在会导致基态能出现不连续跃迁,量子点间的耦合强度和电子之间的库仑相互作用对量子点系统的基态跃迁又很大影响,量子点内部的关联会导致一系列基态跃迁消失(幻数角动量消失),而这些基态跃迁在单层量子点中依然存在。

攻读硕士期间发表的论文

1. Ground State Transitions in Vertically Coupled N-layer Single Electron Quantum Dots. *Solid State Communications* 128 (2003) pp. 369 - 373
2. Two Interacting Electrons in a Vertically Coupled Quantum Dot. *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)* 41 (2004) pp. 619 - 622
3. Ground state transitions in vertically coupled four-layer single electron quantum dots. *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)* (accepted)

致 谢

本论文是在我的导师解文方教授的精心指导和亲切关怀下完成的。解老师渊博的学识,严谨的治学态度,忘我的工作作风和对物理科学研究孜孜不倦的精神深深的影响着、鼓励和鞭策着我。同时,在生活上对我的关心和帮助也使我终身难忘。在此,三年的感触汇成一声祝福,祝解老师身体健康,阖家欢乐,万事如意!

郭康贤教授、谢洪鲸教授、陈渊副教授和沈毅强老师,研究生处以及科研办的贾莲霞老师在我攻读硕士学位期间,在学习和生活上都给了我很大的帮助和支持。在此,谨向你们表示衷心的感谢!

攻读硕士学位期间,同窗好友王兆明、牛丽霞、张麟、王瑞强、邓永晴和张宏,以及师弟刘畅、黄锦胜和胡爱元,室友张翅,是你们陪我度过了三年的美好时光,给了我永远难忘的研究生生活。在此,非常谢谢你们!

此外,本课题得到了国家自然科学基金(项目批准号 10275014 和 10475021)和广东省自然科学基金的资助,在此,谨致谢意!

最后感谢我的家人以及其他关心和支持我的朋友!