Diplomarbeit

Untersuchung zum Übergang Wigner-Kristall/Fermi-Flüssigkeit in einem Quantenpunkt

Stephan Rafler

Betreuung: Michael Flohr

Hannover, 30. September 2002

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

In dieser Diplomarbeit geht es um Quantenpunkte und die Zustände von darin befindlichen Elektronen. Es wird erwartet, daß bei bestimmten Werten von physikalischen Parametern wie Elektronenanzahl, Temperatur und Magnetfeldstärke die Elektronenmaterie Zustände annimmt, die man im Analogon zu gewöhnlicher Materie "gasförmig", "flüssig" und "fest" nennen kann. Der gasförmige Zustand entspricht dann dem bekannten Fermi-Elektronengas wie es in Metallen vorkommt. Die Wellenfunktion ist komplett delokalisiert, die kinetische Energie der Elektronen ist viel größer als die Coulombabstoßungsenergie zwischen ihnen. Der kristalline Zustand ist der lange von Wigner vorhergesagte Wigner-Kristall von Elektronen. Diesen Materiezustand herzustellen und zu vermessen ist seitdem ein großer Traum der Physiker und Quantenpunkte bieten hierzu eine gute Gelegenheit. Im Wignerkristall sind die Elektronen stark lokalisiert – man erwartet, daß sie ein hexagonales Gitter bilden – und die Coulombenergie hat die Oberhand über die kinetische Energie. Der flüssige Zustand ist ein Zustand zwischen gasförmig und kristallin und wird im Laufe der Arbeit noch genauer zu beschreiben sein. Außerdem ist wichtig, ob der Übergang zwischen den Phasen "fest", "flüssig" und "gasförmig" abrupt oder kontinuierlich stattfindet und welche Rolle die physikalischen Parameter dabei spielen.

Die Begriffe Quantenpunkt und Wigner-Kristallisation werden explizit erklärt werden müssen. Dazu gehen wir im ersten Kapitel auf Quantenpunkte ein. Dort wird zuerst kurz deren technische Realisierung dargestellt. Dann wird ein analytisch lösbarer Fall untersucht, nämlich der von einem Elektron in einem parabolischen Potential. Als nächstes sehen wir uns den Fall von mehreren nicht-wechselwirkenden und dann den von wechselwirkenden Elektronen an. Diese Systeme sind nicht mehr analytisch lösbar, und wir stellen numerische Methoden zu ihrer Untersuchung vor. Schließlich werden noch einige weitere Eigenschaften von und Untersuchungen zu Quantenpunkten beschrieben, die bis dahin noch nicht erwähnt wurden.

So ist der Übergang zum zweiten Kapitel nahtlos, denn dort geht es um Wigner-Kristallisation, ebenfalls eine erwartete Eigenschaft von Quantenpunkten. Diese wird oft an Modellen ähnlich Quantenpunkten studiert und zwar sowohl mit klassischen Punktteilchen als auch quantenmechanisch. Das Kapitel wird im wesentlichen aus der Vorstellung von Arbeiten zu den Teilbereichen Wigner-Kristallisation klassisch/quantenmechanisch und Wigner-Kristallisation in Quantenpunkten bestehen.

Im dritten Kapitel stellen wir dann "unser" Quantenpunkt-Modell vor, d.h. das Modell von Michael Flohr. Es beruht hauptsächlich auf Kombinatorik, und ist ansonsten eine Mischung aus quantenmechanischer und klassischer Betrachtungsweise. Deshalb wird das Modell in dieser Arbeit als kombinatorisches Modell bezeichnet. Zunächst wird es um experimentell (noch) nicht zugängliche Zustände von Quantenpunkten gehen, wo der Gesamtdrehimpuls des Systems fest vorgegeben ist, bei denen aber die gewünschten Anzeichen von Wigner-Kristallisation und Fermi-

Flüssigkeit bereits beobachtbar sind. Dann werden wir die Einschränkung des festen Gesamtdrehimpulses aufheben, um Vorhersagen machen zu können, die qualitativ mit realen Experimenten verglichen werden können.

Im vierten Kapitel werden wir uns eine analytische Wellenfunktion ansehen, die reale Wellenfunktionen wie sie in Quantenpunkten vorkommen, sehr gut approximieren könnte. In wie weit sie das tut, und in wie weit sie auch die Wigner-Kristallisation beschreibt, wird zu untersuchen und zu quantifizieren sein. Außerdem werden wir kurz auf die physikalische Interpretation dieser besonderen Wellenfunktion eingehen.

Es folgen noch einige Anhänge mit Nebenrechnungen und anderen Dingen, die nicht in den Haupttext aufgenommen wurden, weil sie den Argumentationsfluß gestört hätten. Das ganze wird abgerundet durch eine nach Thema und Erscheinungsdatum geordnete Bibliographie.

Kapitel 1

Quantenpunkte

1.1 Technische Realisierung

Quantenpunkte sind quasi-nulldimensionale Strukturen, die man in Halbleiterheterostrukturen herstellen kann und in denen sich eine feste, kleine Anzahl von Elektronen befindet.

Was heißt quasi-nulldimensional? Natürlich sind alle Strukturen, die Menschen herstellen können dreidimensional. Was hier gemeint ist, sind die Freiheitsgrade der Bewegung von Elektronen in diesen Strukturen. Man sagt, ein Elektron habe in einer Raumrichtung keine Bewegungsfreiheit, wenn die Energie in dieser Richtung so stark quantisiert ist, daß das unterste und das darüber befindliche Energieniveau weiter auseinanderliegen als alle anderen typischen Energien des Systems. Das ist genau dann der Fall, wenn die Abmessung des Systems in dieser Richtung kleiner ist, als die deBroglie-Wellenlänge der Elektronen bei den typischen Energien des Systems. Mit "Abmessung" ist hier der räumliche Abstand von Flächen gemeint, an denen die Fermi-Energie wiederum höher ist, als die Energie der Elektronen zwischen diesen Flächen, sodaß sie dort nicht eindringen können. Strukturen, die diese Merkmale haben, kann man wie gesagt mit der modernen Halbleiter- und Oberflächentechnik herstellen. Man muß bedenken, daß die Elektronen in Halbleitern durch die Wechselwirkung mit den Atomrümpfen eine sogenannte effektive Masse haben, die kleiner ist als die freie Elektronenmasse, und daß sie dadurch eine größere deBroglie-Wellenlänge haben. Außerden werden solche Systeme bei Experimenten auf Temperaturen nahe des Nullpunkts gekühlt, was die deBroglie-Wellenlänge nochmals vergrößert.

Mit der Erfindung des integrierten Schaltkreises hat sich die Technik der Herstellung von Halbleiterstrukturen rapide entwickelt. Am Anfang (etwa 1970) standen die sogenannten "Quantum-Wells", in denen die Bewegung der Elektronen auf eine Ebene beschränkt wurde (zweidimensionales Elektronengas). In solchen Strukturen wurde der ganzzahlige Quanten-Hall-Effekt (IQHE) [1] und der fraktionierte Quanten-Hall-Effekt (FQHE) [2] entdeckt. Theoretische Arbeiten von Laughlin [40, 41, 42] und Jain [43] lieferten ein sehr gutes Modell von den Effekten.

Der nächste Schritt in Richtung Quantenpunkt war das Herausschneiden von sogenannten "Quantum-Wires" – also eindimensionalen Strukturen – aus den "Quantum-Wells" mit Lithographietechniken. Einen Quantenpunkt erhält man dann durch einen weiteren Schnitt in der senkrechten Richtung. Es gibt inzwischen viele andere Herstellungsverfahren. Alle haben aber immer noch gemeinsam, daß letztendlich eine Ebene sehr stark verkleinert wird. Das heißt, die Bewegung der Elektronen ist in einer Richtung immer noch viel stärker beschränkt als in den zwei senkrechten dazu. Deshalb wird als ein gutes Modell für Quantenpunkte angesehen, wenn man zweidimensionale Elektronen betrachtet, die in einem entsprechend kleinen Potential in der Ebene gebunden sind. Verschiedene Computersimulationen [4] und Experimente [5, 6, 3] haben gezeigt, daß es außerdem eine sehr gute Näherung darstellt, wenn dieses Potential parabolische Form hat, selbst wenn der eigentliche Quantenpunkt z.B. viereckig ist. In den Experimenten ist der Abstand zwischen Energieniveaus fast unabhängig von der Elektronenanzahl, was auf ein parabolisches Potential hinweist (siehe dazu auch Abschnitt 1.5). Der parabolische Anteil ist dabei viel kleiner als das gesamte einschließende Potential.

Typische Durchmesser von Quantenpunkten sind 100nm und typische Höhen 10nm. Man ist aber an der Entwicklung von Quantenpunkten mit 10nm Ausdehnung in allen drei Raumrichtungen. Arbeiten zur Frage was passiert, wenn man die dritte Dimension in das Theoretische Modell integriert, gibt es bereits [23]. Daß es so schwierig ist, Nanostrukturen in allen drei Raumrichtungen zu erzeugen, mag daran liegen, daß die meisten Techniken mit Ätzen, Aufdampfen und Lithographie zu tun haben, also Techniken sind, die eine Ebene und Licht in bestimmten Wellenlängen als Arbeitsgrundlage brauchen. Außerdem müssen für Experimente noch Strukturen wie Elektroden vorhanden sein, die einen experimentellen Zugang erlauben.

Eine andere Möglichkeit, die Bewegung von Elektronen einzuschränken, sind sehr starke Magnetfelder. Die Elektronen bewegen sich dann auf Kreisbahnen mit sehr kleinem Durchmesser. Wenn dieser Durchmesser in die Größenordung von Nanometern kommt, passiert ähnliches wie beim Quantenpunkt. Die Energie der Elektronen wird quantisiert, die entsprechenden Energieniveaus sind die Landau-Niveaus [49]. Interessant ist nun, beide Effekte – Beschränkung der Elektronenbewegung durch das Potential eines Quantenpunkts und durch starke externe Magnetfelder – kombiniert zu studieren.

Das faszinierende an Quantenpunkten ist die Kontrollierbarkeit der Parameter Elektronenanzahl, Magnetfeld und einschließendes Potential, sodaß sie sozusagen ein “Spielzeugmodell” für das Studium grundlegender Eigenschaften von Vielteilchensystemen und Elektronenmateriezuständen darstellen.

1.2 Der Ein-Elektron-Zustand

Wir legen oben genanntes Modell zugrunde, bestehend aus einem zweidimensionalen Elektron, das in einem parabolischen Potential in der Ebene gebunden ist, und einem senkrecht zu dieser Ebene stehenden Magnetfeld. Die Masse des Elektrons ist die effektive Masse, die typischerweise weniger als ein zehntel der freien Elektronenmasse ist. Bereits 1930 haben Fock [47] und Darwin [48] die analytischen Lösungen dieses Modells berechnet, allerdings mit etwas anderen Mitteln als hier.

Es fehlt in der folgenden Rechnung der Spin des Elektrons, d.h. insbesondere die Spin-Magnetfeld- und die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Eine Aussage über die Zeeman-Aufspaltung, also den Abstand der beiden unterschiedlichen Energien, die entstehen, wenn sich der Spin des Elektrons entweder parallel oder antiparallel zum äußeren Magnetfeld einstellt, wird im Anschluß an die Rechnung einfach einzufügen sein.

Genau wie den eindimensionalen harmonischen Oszillator kann man diesen zweidimensionalen harmonischen Osziallator behandeln, indem man Leiteroperatoren definiert, und diese dann auf einen definierten Vakuumzustand anwendet, um die Wellenfunktion (z.B. in Ortsraumdarstellung) zu erhalten.

Wir gehen aus von dem Einteilchen-Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2 \tag{1.1}$$

Wir wählen die symmetrische (oder Kreuz-) Eichung.

$$\vec{B} = (0,0,B), \quad \vec{B} = \operatorname{rot}\vec{A}, \quad \vec{A} = \frac{1}{2}B(-y,x,0) \tag{1.2}$$

Außerdem haben wir

$$\vec{r} = (x,y,0), \quad \vec{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla = -\mathrm{i}\hbar(\partial_x,\partial_y,0) \tag{1.3}$$

Damit ergibt sich, wenn man die Klammer zum Quadrat ausgerechnet hat

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2+\partial_y^2) + \frac{1}{2m}2\mathrm{i}\hbar\frac{e}{c}\frac{B}{2}(x\partial_y - y\partial_x) + \frac{1}{2m}\frac{e^2}{c^2}\frac{B^2}{4}(x^2+y^2) + \frac{1}{2}m\omega_0^2r^2 \tag{1.4}$$

Wir erkennen die Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{eB}{mc} \tag{1.5}$$

und fassen die beiden letzten Terme zusammen ($r^2 = x^2 + y^2$)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2+\partial_y^2) + \frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar\omega_c(x\partial_y - y\partial_x) + \frac{1}{2}m(\omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2)(x^2+y^2) \tag{1.6}$$

Wir erkennen eine neue charakteristische Frequenz des Systems

$$\Omega^2 = \omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2 \tag{1.7}$$

Nun möchten wir zu komplexen Koordinaten übergehen und sehen uns dazu folgende Schreibweise des Hamiltonian an

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x + \mathrm{i}\partial_y)(\partial_x - \mathrm{i}\partial_y) + \frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar\omega_c(x\partial_y - y\partial_x) + \frac{1}{2}m\Omega^2(x+\mathrm{i}y)(x-\mathrm{i}y) \tag{1.8}$$

Wir setzen die komplexen Koordinaten

$$z = x + \mathrm{i}y, \quad \bar{z} = x - \mathrm{i}y, \quad \partial = \frac{1}{2}\left(\partial_x - \mathrm{i}\partial_y\right), \quad \bar{\partial} = \frac{1}{2}\left(\partial_x + \mathrm{i}\partial_y\right), \tag{1.9}$$

beobachten, daß

$$z\partial = (x+\mathrm{i}y)\frac{1}{2}(\partial_x - \mathrm{i}\partial_y) = \frac{1}{2}(x\partial_x + \mathrm{i}y\partial_x - \mathrm{i}x\partial_y + y\partial_y), \tag{1.10}$$

$$\bar{z}\bar{\partial} = (x-\mathrm{i}y)\frac{1}{2}(\partial_x + \mathrm{i}\partial_y) = \frac{1}{2}(x\partial_x - \mathrm{i}y\partial_x + \mathrm{i}x\partial_y + y\partial_y), \tag{1.11}$$

$$\bar{z}\bar{\partial} - z\partial = \mathrm{i}(x\partial_y - y\partial_x), \tag{1.12}$$

und können damit den Hamiltonian nun schreiben als

$$H = -\frac{2\hbar^2}{m}\partial\bar{\partial} + \frac{1}{2}\hbar\omega_c(\bar{z}\bar{\partial} - z\partial) + \frac{1}{2}m\Omega^2 z\bar{z} \tag{1.13}$$

In Anhang A.1 findet sich die gleiche Rechnung in Polarkoordinaten, die für dieses rotationssymmetrische Problem besonders angemessen erscheinen. Wir ziehen nun einen Faktor heraus

$$H = \frac{1}{2}m\omega_c^2 \left(-\frac{4\hbar^2}{m^2\omega_c^2}\partial\bar{\partial} + \frac{\hbar}{m\omega_c}(\bar{z}\bar{\partial} - z\partial) + \frac{\Omega^2}{\omega_c^2}z\bar{z}\right) \tag{1.14}$$

und erkennen eine charakteristische Länge, die magnetische Länge

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \tag{1.15}$$

die wir auch noch herausziehen, um einen dimensionslosen Hamiltonian zu erhalten

$$H = \frac{1}{2}m\omega_c^2 l_B^2 \left(-4\ l_B\partial\ l_B\bar{\partial} + (\bar{z}\bar{\partial} - z\partial) + \frac{\Omega^2}{\omega_c^2}\frac{z}{l_B}\frac{\bar{z}}{l_B}\right) \tag{1.16}$$

Nun definieren wir eine neue Länge, die mit der magnetischen Länge zusammenhängt

$$l_0 = \frac{l_B}{\sqrt[4]{1 + 4\omega_0^2/\omega_c^2}} = \sqrt{\frac{\omega_c}{2\Omega}}\, l_B \tag{1.17}$$

und setzen diese für l_B ein. Alle Längen im System werden mit dieser Länge skaliert sein. Wir ziehen noch das Frequenzverhältnis heraus und haben insgesamt

$$H = \hbar\Omega \left(-\ 2l_0\partial\ 2l_0\bar{\partial} + \frac{z}{2l_0}\frac{\bar{z}}{2l_0}\right) + \frac{1}{2}\hbar\omega_c(\bar{z}\bar{\partial} - z\partial) \tag{1.18}$$

Nun sind wir soweit, die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren angeben zu können

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\bar{z}}{2l_0} - 2l_0\partial\right), \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{z}{2l_0} + 2l_0\bar{\partial}\right), \tag{1.19}$$

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{z}{2l_0} - 2l_0\bar{\partial}\right), \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\bar{z}}{2l_0} + 2l_0\partial\right), \tag{1.20}$$

deren Kommutatoren

$$[a, a^+] = 1, \quad [b, b^+] = 1, \tag{1.21}$$

sind, wobei alle anderen verschwinden. Das heißt insbesondere, daß die a-Operatoren und die b-Operatoren voneinander unabhängig sind. Der Hamiltonian kann nun in Summenform geschrieben werden

$$H = \hbar\omega_+\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_-\left(b^+b + \frac{1}{2}\right) \tag{1.22}$$

d.h. als Paar voneinander unabhängiger harmonischer Oszillatoren mit Frequenzen

$$\omega_+ = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2} + \frac{1}{2}\omega_c, \quad \omega_- = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2} - \frac{1}{2}\omega_c \tag{1.23}$$

und Energieeigenwerten (Fock-Darwin-Niveaus)

$$E(n_+, n_-) = \hbar\omega_+\left(n_+ + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_-\left(n_- + \frac{1}{2}\right) \tag{1.24}$$

oder auch als

$$H = \hbar\Omega\left(a^+a + b^+b + 1\right) - \frac{1}{2}\hbar\omega_c\left(b^+b - a^+a\right) \tag{1.25}$$

mit Eigenwerten

$$E(n,m) = \hbar\Omega(n+1) - \frac{1}{2}\hbar\omega_c m \tag{1.26}$$

wobei die Paare (n,m) und (n_+, n_-) verbunden sind durch die Relationen

$$n = n_- + n_+, \quad m = n_- - n_+ \tag{1.27}$$

Die Eigenfunktionen werden konstruiert, indem man die Erzeugungsoperatoren auf einen geeigneten Vakuumzustand wie

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z\bar{z}}{4l_0^2}\right), \quad a|00\rangle = b|00\rangle = 0 \tag{1.28}$$

anwendet

$$|n_+n_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_+!\; n_-!}} \left(a^+\right)^{n_+} \left(b^+\right)^{n_-} |00\rangle \tag{1.29}$$

Da das System Rotationssymmetrisch ist, muß es einen Drehimpulsoperator geben, der mit H kommutiert. Dieser ist gegeben als

$$L = b^+b - a^+a = z\partial - \bar{z}\bar{\partial} = xp_y - yp_x = -\mathrm{i}\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \tag{1.30}$$

und liefert angewandt auf die Fock-Darwin-Zustände die Drehimpulsquantenzahl

$$L|n_+n_-\rangle = (n_- - n_+)\,|n_+n_-\rangle = m\;|n_+n_-\rangle \tag{1.31}$$

Manchmal ist eine Darstellung von $|n_+n_-\rangle$ in Polarkoordinaten (r,θ) praktisch. Dazu nutzen wir zuerst oben genannte Drehsymmetrie aus, denn damit separiert die Winkelabhängkeit und die Wellenfunktion kann als Produkt geschrieben werden

$$\psi_{nm}(r,\theta) = \phi_m(\theta)R_{nm}(r) \tag{1.32}$$

mit dem winkelabhängigen Teil

$$\phi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta} \tag{1.33}$$

der Eigenfunktion des Drehimpulsoperators mit Eigenwert m ist. Der Radialteil ergibt sich als Lösung der Differentialgleichung, die man erhält, wenn man den Hamiltonian in Polarkoordinaten schreibt, und die Variablen separiert, zu

$$R_{nm}(r) = \frac{\sqrt{2}}{l_0}\sqrt{\frac{n_r!}{(n_r+|m|)!}}\left(\frac{r}{l_0}\right)^{|m|} \exp\left(-\frac{r^2}{2l_0^2}\right) L_{n_r}^{|m|}(r^2/l_0^2) \tag{1.34}$$

Dabei werden die Laguerre-Polynome benutzt

$$L_{n_r}^{|m|}(z) = \frac{1}{m!}z^{-|m|}\mathrm{e}^z\partial_z^{n_r} z^{n_r+|m|}\mathrm{e}^{-z} \tag{1.35}$$

und es ist

$$n = 2n_r + |m| = 0, 1, 2, \ldots \tag{1.36}$$

die Hauptquantenzahl,

$$m = -n, -n+2, \ldots, n-2, n \tag{1.37}$$

die Drehimpulsquantenzahl und

$$n_r = (n - |m|)/2 \tag{1.38}$$

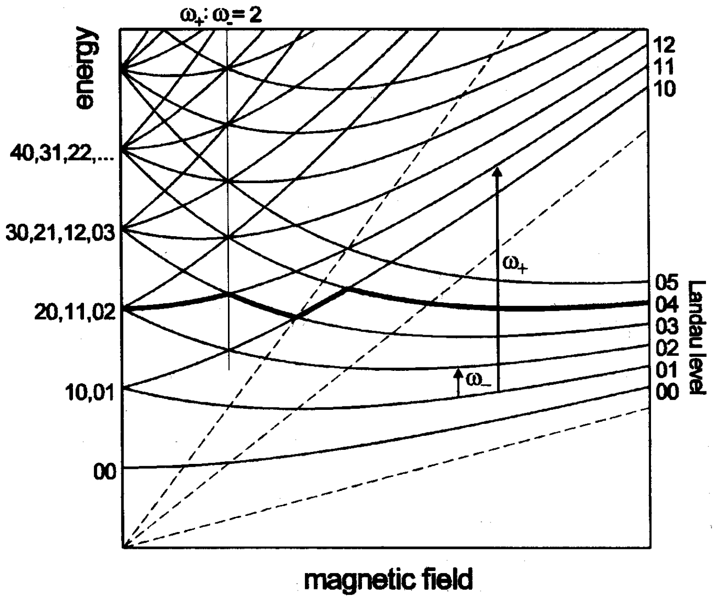


Abbildung 1.1: Fock-Darwin-Niveaus eines zweidimensionalen Elektrons in einem parabolischen Potential und einem senkrechten Magnetfeld. Abbildung aus [20].

die radiale Quantenzahl, die ganzzahlig sein muß. Die Entwicklung der Energieniveaus in einem stärker werdenden Magnetfeld ist in Abbildung 1.1 zu sehen. Die Zahlenpaare an den vertikalen Achsen bezeichnen die Eigenzustände $|n_+, n_-\rangle$. Die gestrichelten Linien geben die Landau-Niveaus an, also die Energien ohne einschließendes Potential $\omega_0 = 0$, $\omega_- = 0$ bzw. für sehr großes Magnetfeld $\omega_c \gg \omega_0$

$$E(n_+) = \hbar\omega_c \left(n_+ + \frac{1}{2}\right), \quad n_+ = 0, 1, 2, \ldots \tag{1.39}$$

Für bestimmte Werte des Magnetfelds wo das Verhältnis $\omega_+ : \omega_-$ ganzzahlig ist, sind die Niveaus entartet und es findet ein schneller Wechsel zwischen den Elektronenorbitalen statt (siehe dicke Linie). Außerdem sind in dem Bild noch erlaubte optische Übergänge eingezeichnet, nach den Übergangsregeln

$$n_+ \to n_+ \pm 1 \quad \text{oder} \quad n_- \to n_- \pm 1 \tag{1.40}$$

Nicht eingezeichnet ist die Zeeman-Aufspaltung jedes Niveaus

$$E_z = g\mu_B B S_z, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \tag{1.41}$$

die sehr klein ist und linear mit B anwächst, aber dafür sorgt, daß in starken Magnetfeldern die Elektronen spin-polarisiert sind.

Wir haben in diesem Abschnitt also bereits gesehen, wie man in Quantenpunkten das Verhalten von Elektronen steuern kann: bei kleinem Magnetfeld dominiert das einschließende Potential die Quantisierung, während bei sehr großen Magnetfeldern die Elektronen auf sehr engen Orbitalen umlaufen, die viel kleiner sind als der Radius des Quantenpunkts, sodaß sie wieder eher das Verhalten von freien Elektronen zeigen.

1.3 Mehrere nicht-wechselwirkende Elektronen

Die Einzelelektronenzustände haben wir nicht zuletzt deshalb ausgerechnet, weil sie unter bestimmten Umständen eine gute Basis für den Hilbertraum der Mehrelektronenzustände bilden. Wir haben gesehen, daß die Einzelelektronenzustände dargestellt werden können durch die Laguerre-Polynome und diese bilden einen Satz orthonormaler Polynome. Die Orthonormalitätsrelation ist

$$\int_0^\infty dx\ e^{-x} x^a L_a^m(x) L_a^n(x) = \delta_{mn} \frac{\Gamma(n+a+1)}{n!} \tag{1.42}$$

Natürlich könnte man jeden Satz orthonormaler Polynome als Basis für den Hilbertraum nehmen, aber eine gute Basis hat die Eigenschaft, daß Linearkombinationen aus möglichst wenigen Basisvektoren schon sehr gute Näherungen für den Gesamtzustand liefern. Man kann sich also schon denken, daß die Basis aus Einzelelektronenzuständen nur dann eine gute Basis ist, wenn die Elektronen das Verhalten von freien Elektronen zeigen, also bei hohen kinetischen Energien und vernachlässigbarer Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

Wir betrachten hier den Hamiltonian von N Elektronen ohne Wechselwirkung

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i) \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 r_i^2 \right) \tag{1.43}$$

Die Energien lassen sich sofort hinschreiben

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i = \sum_{i=1}^{N} \left(\hbar\Omega(n_i+1) + \frac{1}{2}\hbar\omega_c m_i \right) = \hbar\Omega N_{\text{tot}} + \frac{1}{2}\hbar\omega_c L_{\text{tot}} + \hbar\Omega N \tag{1.44}$$

wobei die E_i der Größe nach geordnet werden können. Um einen Eigenzustand zu diesem Hamiltonian zu erhalten, genügt es nicht, das Produkt der Einteilchenzustände hinzuschreiben. Man muß antisymmetrisieren, sodaß Anteile mit gleichen Quantenzahlen oder Orten automatisch herausfallen, da die Elektronen als Fermionen das Pauliprinzip befolgen. Dazu bildet man die Slaterdeterminante aus den entsprechenden Einteilchenzuständen

$$\Psi(z_1, \ldots, z_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(z_1) & \ldots & \psi_N(z_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(z_N) & \ldots & \psi_N(z_N) \end{vmatrix} \tag{1.45}$$

Welche Einteilchenzustände man nimmt, hängt von der betrachteten Situation ab. Eigentlich müsste man alle unendlich vielen Zustände betrachten, was in numerischen Rechnungen unmöglich ist. Da man die Zustände nach ihren Energien ordnen kann, kann man einen Energie-Cutoff einführen und nur Zustände mit kleinerer Energie als der Cutoff-Energie betrachten. Bei einer Erhöhung des Cutoffs tragen immer mehr Zustände bei, wobei Zustände mit höherer Energie einen kleineren Beitrag liefern. So konvergiert der Gesamtzustand gegen einen Grenzwert.

Eine andere Möglichkeit nutzt aus, daß in sehr starken Magnetfeldern Elektronen nur das niedrigste Landau-Niveau besetzen, wie wir gesehen haben. Einteilchenzustände sind dann nach (1.29) gegeben durch

$$|0\ n_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\ n_-!}} \left(b^+\right)^{n_-} \exp\left(-\frac{z\bar{z}}{4l_0^2}\right) \tag{1.46}$$

also für das niedrigste Landau-Niveau

$$\psi_m(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi 2^m m!}} \left(\frac{z}{l_0}\right)^m \exp\left(-\frac{|z|^2}{4l_0^2}\right) \tag{1.47}$$

wobei m aus einer Menge

$$M_i = [\, m_1, \ldots, m_N], \quad 0 \leq m_1 < m_2 < \cdots < m_N \tag{1.48}$$

von Drehimpulsquantenzahlen ist. Der Gesamtzustand des Systems ist nun gegeben durch eine Linearkombination von Slaterdeterminanten mit jeweils anderer Verteilung der Einzeldrehimpulse

$$\Psi_{\text{ges}}(z_1, \ldots, z_N) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathrm{C}_i \Psi_i(z_1, \ldots, z_N) \tag{1.49}$$

Die Ψ_i bilden als Slaterdeterminanten von orthonormalen Zuständen ein orthonormales System

$$\int dz\ \Psi_i^* \Psi_k = \delta_{ik} \tag{1.50}$$

Deshalb kann man eine Maxwell-Boltzmann-Besetzung der Zustände annehmen

$$C_i^2 = \exp(-\beta E_i) \tag{1.51}$$

und die Zustandssumme des normierten Grundzustandes angeben

$$Z = \sum_{i=1}^{\infty} \exp(-\beta E_i) = 1 \tag{1.52}$$

durch deren Normierung man die Temperatur des Systems bestimmen kann. Wenn man jedoch nur den Zustand mit der niedrigsten Energie bei einer Temperatur die gegen Null geht betrachtet,

$$Z = \sum_{i=1}^{\infty} \exp(-\beta E_i) \stackrel{\beta \to \infty}{=} \exp(-\beta E_1) \tag{1.53}$$

dann trägt nur noch der Zustand mit

$$M_1 = \{\, 0, 1, \ldots, N-1\} \tag{1.54}$$

bei, d.h. die N untersten Drehimpulsorbitale werden besetzt. Der Gesamtdrehimpuls dieses Zustandes ist

$$L_{\text{tot}} = \sum_{n=1}^{N} m_n = \frac{N(N-1)}{2} \tag{1.55}$$

Wir werden in Kapitel 4 genauer auf diese Art von Wellenfunktionen eingehen.

1.4 Mehrere wechselwirkende Elektronen

Vielteilchenprobleme mit langreichweitiger Wechselwirkung wie der Coulomb-Wechselwirkung sind analytisch nicht lösbar und auch numerisch schwierig zu behandeln. Daß man die Coulomb-Wechselwirkung bei Quantenpunkten mit einbeziehen muß, ist unausweichlich, denn gerade dadurch entstehen ja die besonderen Eigenschaften wie z.B. die Wigner-Kristallisation. In Quantenpunkten mit parabolischem Potential ist es eher der Fall, daß die Coulombenergie die Oberhand über die kinetische Energie hat, anders als z.B. in Atomen. Das dortige anziehende Coulombpotential des Atomkerns hat eine Singularität im Mittelpunkt und ist viel steiler, was den gebundenen Elektronen eine viel höhere kinetische Energie gibt. Deshalb funktionieren in diesem Bereich Näherungsmethoden wie die Störungsrechnung und die Hartree-Fock-Methode so gut, die die Wechselwirkung als klein gegenüber der kinetischen Energie ansehen. Trotzdem werden diese Methoden auch auf Quantenpunkte angewandt. Bei den Ergebnissen muß man sehr aufpassen, in welchen Bereichen sie gültig sind. Eine Methode, deren Ergebnisse auf jeden Fall verlässlich sind, ist die exakte Diagonalisierung. Dies allerdings um den Preis eines immens steigenden Rechenaufwands bei größer werdenden Teilchenzahlen.

Der Hamiltonian mit Wechselwirkung ist gegeben als

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i) \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 r_i^2 \right) + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{1.56}$$

wobei ε die sogenannte dielektrische Hintergrundkonstante ist, die die Abschirmung der Elektronenladung e durch die positive Ladung der Atomrümpfe in dem Medium beschreibt. Das Coulombmatrixelement, das für die exakte Diagonalisierung benötigt wird, erhält man aus den Einzelelektronzuständen in der Form

$$\psi_{nm}(x,\theta) = \left(\frac{n!}{(|m|+n)!} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\mathrm{i}m\theta} e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{|m|} L_n^{|m|}(x^2) \tag{1.57}$$

und den Laguerre-Polynomen in Summenform

$$L_n^{|m|}(x^2) = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{(n+|m|)!}{(n-k)!\,(|m|+k)!\,k!} x^{2k} \tag{1.58}$$

aus

$$\langle n_1 m_1 n_2 m_2 | V | n_3 m_3 n_4 m_4 \rangle = \int d^2 r_1 \int d^2 r_2 \; \psi^*_{n_1 m_1} \psi^*_{n_2 m_2} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_{n_3 m_3} \psi_{n_4 m_4} \tag{1.59}$$

Es ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \langle 12|V|34 \rangle \;=\; & \delta_{m_1+m_2,m_3+m_4} \left(\prod_{i=1}^{4} \frac{n_i!}{(|m_i|+n_i)!} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{j_1=0}^{n_1} \sum_{j_2=0}^{n_2} \sum_{j_3=0}^{n_3} \sum_{j_4=0}^{n_4} \\ & \times \left(\prod_{i=1}^{4} \binom{n_i + |m_i|}{n_i - j_i} \right) \frac{1}{2^{(G+1)/2}} \sum_{l_1=0}^{\gamma_1} \sum_{l_2=0}^{\gamma_2} \sum_{l_3=0}^{\gamma_3} \sum_{l_4=0}^{\gamma_4} (-1)^{\gamma_2+\gamma_3-l_2-l_3} \\ & \times \delta_{l_1+l_2,l_3+l_4} \left(\prod_{i=1}^{4} \binom{\gamma_i}{l_i} \right) \Gamma\left(1 + \frac{\Lambda}{2}\right) \Gamma\left(\frac{G-\Lambda+1}{2}\right) \end{aligned} \tag{1.60}$$

wobei

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= j_1 + j_4 + (|m_1| + m_1)/2 + (|m_4| - m_4)/2 \\ \gamma_2 &= j_2 + j_3 + (|m_2| + m_2)/2 + (|m_3| - m_3)/2 \\ \gamma_3 &= j_2 + j_3 + (|m_2| - m_2)/2 + (|m_3| + m_3)/2 \\ \gamma_4 &= j_1 + j_4 + (|m_1| - m_1)/2 + (|m_4| + m_4)/2 \\ G &= \sum_{i=1}^{4} \gamma_i, \quad \Lambda = \sum_{i=1}^{4} l_i \end{aligned} \tag{1.61}$$

Dieser Ausdruck ist sehr gut handhabbar für Werte des Fock-Darwin-Levels

$$N_{\mathrm{FD}} = n + (|m| - m)/2 < 5 \tag{1.62}$$

Aber für höhere Werte bekommt man numerische Probleme [22]. Der Ausdruck enthält Terme mit alternierenden Vorzeichen, was bei Fließkomma-Arithmetik und sehr unterschiedlich großen Werten eine Anhäufung von Rundungsfehlern bewirken kann. Ein unkonventioneller Ausweg ist die Benutzung von Festkomma-Arithmetik mit vielen (etwa 600) Dezimalstellen [51]. Eine andere Möglichkeit ist wieder die Vernachlässigung der höheren Landau-Niveaus. Man benutzt die Einzelelektron-zustände in der Form

$$\phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi 2^m m!}} r^m e^{-r^2/4} e^{\mathrm{i}m\theta} \tag{1.63}$$

Mit einer Integraldarstellung für die Coulomb-Wechselwirkung

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty du\ e^{-u^2(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2} \tag{1.64}$$

und einer Taylor-Entwicklung für den Mischterm $e^{2u^2 \vec{r}_1 \vec{r}_2}$ ergibt sich das Matrix-element

$$\begin{aligned} V(m,n,k) &= \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2\ \phi^\dagger_{m+k}(\vec{r}_1)\phi^\dagger_{n-k}(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_m(\vec{r}_1)\phi_n(\vec{r}_2) \\ &= \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{m!n!(m+k)!(n-k)!}} \frac{(2m+2n+1)!!}{2^{m+n+2}} \\ &\quad \times \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(n+p)!(m+k+p)!}{p!(k+p)!} \frac{(2k+4p-1)!!}{2^k 4^p (2p+k+n+m+1)!} \end{aligned} \tag{1.65}$$

Dieser Ausdruck hat den Vorteil, daß alle Terme positiv sind und damit das Problem der Rundungsfehler umgangen wird. Allerdings konvergiert die Reihe sehr langsam.

Die Eigenzustände des Systems beschrieben durch den Hamiltonian (1.56) sind Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses, der durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung erhalten bleibt. Sie können durch eine Quantenzahl J klassifiziert werden, die die Summe der Einzelelektron-Werte l ist. Die Zustände werden numerisch durch Diagonalisierung des Vielteilchen-Hamiltonians berechnet. Zuerst werden die Basiszustände berechnet. Dazu wird die Anzahl der Elektronen n_e, der Gesamt-drehimpuls $J = \sum l$ und der höchste Fock-Darwin-Level $N_{\mathrm{tot}} = \sum N_{\mathrm{FD}}$ bestimmt. Mit wachsendem Gesamtdrehimpuls nimmt die Zahl der Zustände, die zu einem bestimmten Fock-Darwin-Level gehören, ebenfalls zu. So besteht z.B. für vier Elektronen mit $J = 6$ und einem FDL-Index $N_{\mathrm{tot}} = 0$ oder $N_{\mathrm{tot}} = 1$ die Basis aus zwölf Zuständen

$$a^\dagger_{n_1 l_1} a^\dagger_{n_2 l_2} a^\dagger_{n_3 l_3} a^\dagger_{n_4 l_4} |0\rangle \tag{1.66}$$

wobei die Quantenzahlen $(n_1, l_1)(n_2, l_2)(n_3, l_3)(n_4, l_4)$ für $N_{\mathrm{tot}} = 0$ die Werte

$$(0,0)(0,1)(0,2)(0,3)$$

haben, und für den zweiten Fock-Darwin-Level $N_{\mathrm{tot}} = 1$

$$\begin{array}{ll} (0,0)(0,1)(0,2)(0,3) & (0,-1)(0,0)(0,1)(0,6) \\ (0,0)(0,1)(0,3)(1,2) & (0,-1)(0,0)(0,2)(0,5) \\ (0,0)(0,1)(0,4)(1,1) & (0,-1)(0,0)(0,3)(0,4) \\ (0,0)(0,1)(0,5)(1,0) & (0,-1)(0,1)(0,2)(0,4) \\ (0,0)(0,2)(0,3)(1,1) & (0,1)(0,2)(0,3)(1,0) \\ (0,0)(0,2)(0,4)(1,0) & \end{array}$$

Für höhere Werte von J wird die zu diagonalisierende Matrix sehr schnell größer. So gibt es z.B. für vier Elektronen bei Beschränkung auf die zwei niedrigsten Fock-Darwin-Levels bei $J = 22$ bereits 422 Basis-Zustände und 24346 nicht-verschwindende Nebendiagonalelemente. Für fünf Elektronen und $B = 7.5$Tesla tritt der Grundzustand bei $J = 30$ auf, wo man 1669 Basis-Zustände und 140000 nicht-verschwindende Nebendiagonalelemente hat. Dies schränkt die Anzahl der Elektronen, die man mit dieser Methode studieren kann sehr ein.

Wie gehen die Fock-Darwin-Levels in die Berechnung ein? Dazu sehen wir uns zuerst die Einzel-Elektron-Energien an:

$$E_{nl} = (2n + |l| + 1)\hbar\Omega - \frac{1}{2}l\hbar\omega_c = (2N_{\mathrm{FD}} + l + 1)B - lC \tag{1.68}$$

Die Summe für einen Basis-Zustand aus n_e Elektronen ergibt dann

$$E_{\mathrm{tot}} = 2N_{\mathrm{tot}}B + L_{\mathrm{tot}}(B - C) + n_e B \tag{1.69}$$

mit dem Gesamt-FDL-index $N_{\mathrm{tot}} = \sum_{i=1}^{n_e} N_i^{\mathrm{FD}}$ und dem Gesamtdrehimpuls $J = L_{\mathrm{tot}} = \sum_{i=1}^{n_e} l_i$. Die Fock-Darwin-Levels sind entartet wenn $\omega_c \gg \omega_0$, d.h. bei starken Magnetfeldern. Wenn wir uns nun auf $N_{\mathrm{tot}} = 0$ beschränken und einen festen Drehimpuls L_{tot} wählen, können wir Basis-Zustände konstruieren, sodaß das System im niedrigsten Fock-Darwin-Level ist. Für den Fall von $N_{\mathrm{tot}} = 1$ ist das System im zweiten Fock-Darwin-Level, und so weiter. Die Einführung der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen hebt die Entartung der Fock-Darwin-Levels auf und eine Energiebandstruktur entsteht. Mit Wechselwirkung ist N_{tot} nicht erhalten, aber wir müssen uns für die Berechnung an ein maximales N_{tot} halten.

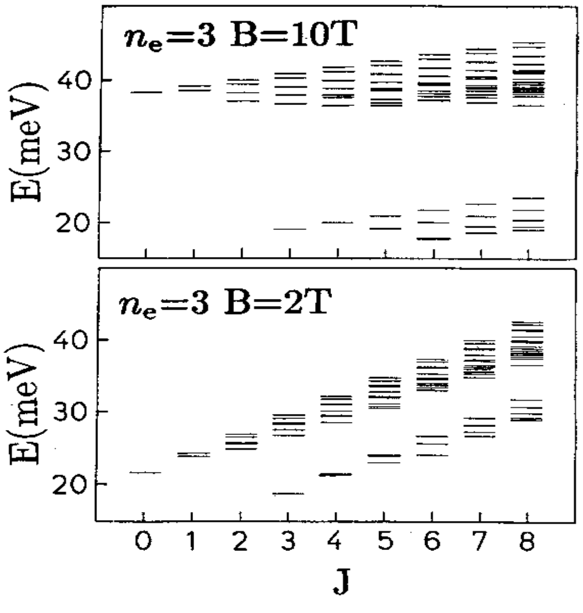


Abbildung 1.2: Energieniveaus für 3 Elektronen. Abbildung aus [22].

Die Energieniveaus eines parabolischen Quantenpunkts sind in den Abbildungen 1.2 und 1.3 für verschiedene Elektronenzahlen und Magnetfeldstärken gezeigt. Sie wurden zuerst berechnet von Maksym und Chakraborty [9] mit Parametern, die einem GaAs-Quantenpunkt entsprechen und $\hbar\omega_0 = 4$meV. Die Konstante von $\hbar\Omega$ pro Elektron ist dabei nicht enthalten. Wie man sieht, gibt es immer zwei Bänder

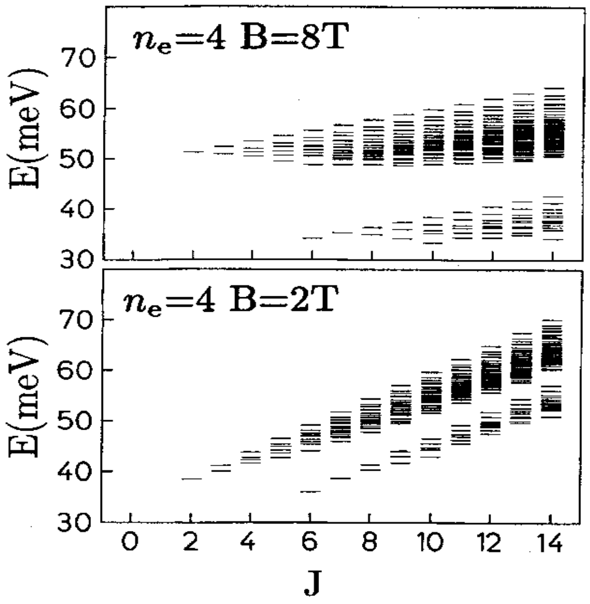


Abbildung 1.3: Energieniveaus für 4 Elektronen. Abbildung aus [22].

getrennt durch eine Lücke. In dem Fall von verschwindendem einschließendem Potential wären dies die beiden untersten Landau-Niveaus. Generell wachsen die Energien mit wachsendem J, weil die Einzelelektronenergien mit l wachsen. Der Hauptunterschied zwischen dem Verhalten bei niedrigem und hohem Magnetfeld ist der Gesamtdrehimpuls des Grundzustandes. Bei $B = 2$Tesla tritt der Grundzustand bei dem kleinstmöglichen J auf, d.h. bei dem kleinsten Gesamtdrehimpuls bei dem alle Elektronen im niedrigsten Fock-Darwin-Level $N_{\mathrm{FD}} = 0$ verweilen können. In dem Beispiel sind die drei Elektronen im Grundzustand bei $J = 3$. Für den nichtwechselwirkenden Fall wäre dies der Grundzustand für ein starkes Magnetfeld, wo nur $N_{\mathrm{FD}} = 0$ relevant ist. Die Wechselwirkung bewirkt, daß das J des Grundzustands mit wachsendem B ebenfalls wächst. Dieser Effekt wird bewirkt durch das Zusammenspiel von Einzelelektronenergie und Wechselwirkungsenergie.

In einem simplen Bild wo nur der niedrigste Fock-Darwin-Level betrachtet wird, ist der Beitrag der Einzelelektronenergie relativ zum niedrigsten Landau-Niveau $\hbar(\sqrt{\omega_c^2/4 + \omega_0^2} - \frac{1}{2}\omega_c)J$. Der Beitrag der Wechselwirkung wird bestimmt durch die numerische Diagonalisierung des Hamiltonians. In Abbildung 1.4 sind die beiden Beiträge und deren Summe zu sehen. Die Einzelelektronenergie wächst linear mit J weil die Elektronen in den höheren Drehimpulszuständen ein höheres einschließendes parabolisches Potential sehen. Der Beitrag der Coulomb-Wechselwirkung fällt dagegen, weil Elektronen mit höherem Drehimpuls einen größeren Bahnradius haben. Das Resultat ist, daß die Summe dieser beiden Funktionen ein Minimum bei einem bestimmten J aufweist. Bei niedrigem Magnetfeld B passiert dies bei dem kleinstmöglichen J weil die Einzelelektronenergie sehr steil anwächst. Bei großen Magnetfeldern hingegen ist der Anstieg weniger steil, sodaß das Minimum bei größerem J auftreten kann.

Eine sehr wichtige hier zu bemerkende Tatsache ist, daß die Grundzustände nur bei bestimmten sogenannten magischen J-Werten auftreten, die abhängig sind von der Elektronenzahl und zwar nach der Relation

$$J = \frac{1}{2}n_e(n_e - 1) + jn_e \tag{1.70}$$

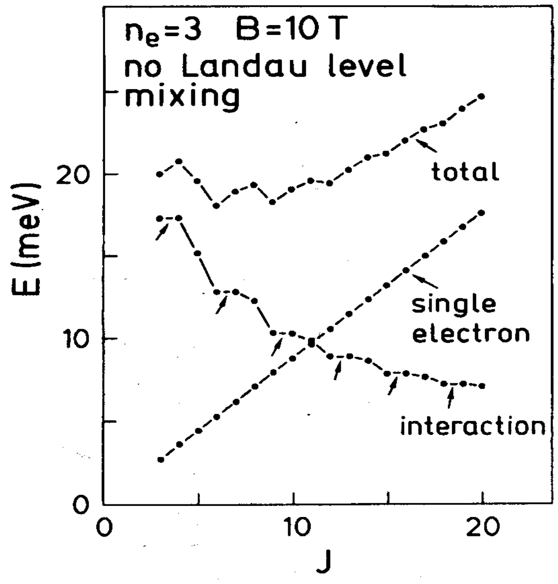


Abbildung 1.4: Beiträge von kinetischer und potentieller Energie [22].

wobei j eine ganze Zahl ist. In diesen Grundzuständen werden die Elektronen sehr effektiv getrennt gehalten. Der Grundzustand hat immer diese J's und das Verhältnis von Wechselwirkung zu einschließendem Potential bestimmt das J. Für $n_e < 5$ hat der Grundzustand alle Elektronen in einem kompakten Block im niedrigsten Landau-Niveau. D.h. alle besetzten Einzelelektron-Orbitale haben $n = 0$ und sind benachbart im Drehimpulsraum. Für $n_e > 5$, wo die $(n_e - 1)$-Symmetrie auftritt, hat der Grundzustand ein Elektron mit $l = 0$ und die restlichen in einem kompakten Block. In [13, 14, 16] wurde gezeigt, daß die Coulombenergie eines kompakten Blocks durch einen großen Austauschanteil sehr effektiv reduziert wird. Damit wird die Gesamtenergie eines Zustandes mit kompaktem Block reduziert. Auch quantenmechanische Symmetrien wie das Pauliprinzip und Rotationsinvarianz spielen eine Rolle [15, 17]. Vom diesem Bild werden wir in Kapitel 3 ausgehen, wo wir auf die kompakten Blöcke nocheinmal zu sprechen kommen.

In diesem Abschnitt haben wir Bekanntschaft mit den magischen Zahlen gemacht. Sie treten auf, weil das Magnetfeld die Wellenfunktion des Systems komprimiert und damit die Coulombenergie erhöht. Bei bestimmten kritischen Marken kann das System die Energie erniedrigen, indem es einen Übergang zu einem neuen Grundzustand macht, der einen größeren räumlichen Umfang hat und einen höheren Drehimpuls. Wenn man das Magnetfeld erhöht, sieht man einen abrupten Übergang zwischen den Grundzuständen mit den magischen J's. Die magischen Zahlen können erklärt werden mit Symmetrien des Grundzustandes als Minimum der Kombination aus einschließendem Potential und Wechselwirkungs-Potential.

1.5 Weitere Untersuchungen und Eigenschaften

Quantenpunkte können nicht direkt spektroskopisch vermessen werden. Stattdessen muß man thermodynamische Größen wie die Magnetisierung oder die Wärmekapazität heranziehen. Das liegt daran, daß in einem parabolischen einschließenden Potential die Bewegung des Schwerpunktes des Vielteilchensystems von der Relativbewegung der Teilchen entkoppelt. Ein Hamiltonian mit parabolischem Potential hat die spezielle Eigenschaft, daß er geschrieben werden kann als

$$H = \frac{1}{2M}\left(\vec{P} + Q\vec{A}\right)^2 + \frac{1}{2}M\omega_0^2 R^2 + H_{\mathrm{rel}} \tag{1.71}$$

wobei

$$\vec{P} = \sum_{i=1}^{N} \vec{p}_i, \quad \vec{R} = \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i, \quad Q = Ne, \quad M = Nm \tag{1.72}$$

Der letzte Term ist eine Funktion der relativen Koordinaten allein und enthält alle Effekte der Wechselwirkung. Die Wellenfunktion kann also einfach als $\psi(\vec{R})\phi(\vec{r}_{ij})$ geschrieben werden und die Eigenenergien sind $E_{nl} + E_{\mathrm{rel}}$ wobei das Spektrum E_{nl} identisch mit den Einzelelektronenergien und unabhängig von N ist. Strahlung, die bei typischen Quantenpunkten im fernen Infrarot liegt, regt nur die Schwerpunktzustände an, aber nicht die relative Bewegung der Elektronen. Eine Möglichkeit, dies zu umgehen ist, Quantenpunkte herzustellen, wo das einschließende Potential von der parabolischen Form abweicht. Zu diesem Thema gibt es eine Reihe theoretischer Untersuchungen [11, 8].

Andere Messungen betreffen Quantenpunkte ohne äußeres Magnetfeld [7]. Hier wurde das elektrochemische Potential gemessen, bzw. die Energie, die benötigt wird, um ein Elektron zum System aus N Elektronen hinzuzufügen

$$\Delta E = E(N+1) - E(N) \tag{1.73}$$

Es ergeben sich hohe Peaks bei den Werten $N = 2, 6, 12$ und etwas weniger hohe bei $N = 4, 9, 16$. Dies deutet auf eine Schalenstruktur hin wie sie auch in Atomen

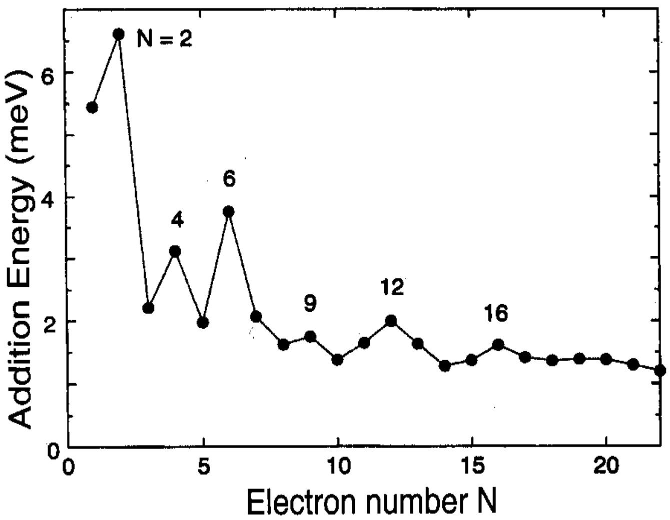


Abbildung 1.5: Hinweis auf eine Schalenstruktur [22]

vorkommt. Die dortigen Werte von abgeschlossenen Schalen $N = 2, 8, 20, \ldots$ werden durch die Hund'schen Regeln erklärt und ähnliche Regeln gelten folglich auch bei Quantenpunkten [21]. Deshalb werden Quantenpunkte häufig als künstliche Atome bezeichnet, trotz aller anderweitigen Unterschiede. Genau wie in Atomen spielen Spineffekte hier eine Rolle.

Kapitel 2

Wigner-Kristallisation

Wigner hat in einem Artikel von 1934 [26] bei einer Untersuchung von Eigenschaften von Elektronen in Metallen die Vermutung geäußert, daß bei sehr tiefen Temperaturen Effekte auftreten sollten, die weder mit der Fermi-Theorie des freien Elektronengases noch mit der von Landau erweiterten Theorie mit Störstellen mehr erklärbar wären. Er vermutete für den Bereich, wo die Coulombenergie der Elektronen größer als die kinetische Energie wird, eine Kristallisation der Elektronen, d.h. eine Lokalisierung der Wellenfunktion in einem Gitter. Dieses Gitter sollte auch die Anordnung von klassischen Punktteilchen sein, die die Coulombenergie minimiert. Daß dies in drei und zwei Dimensionen der Fall ist, ist bereits länger bekannt und gemessen (z.B. an Elektronen auf der Oberfläche von Superflüssigem Helium). Interessant ist die Frage, ob solch ein Phasenübergang auch in einem quasi-nulldimensionalen System existiert.

2.1 ... mit klassischen Punktteilchen

Bedanov und Peeters haben dazu klassische Punktteilchen studiert [27]. Sie betrachten den Hamiltonian

$$H = \sum_{i=1}^{N} V_c(r_i) + \frac{q^2}{\varepsilon} \sum_{j>i}^{N} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.1}$$

für parabolisches einschließendes Potential

$$V_c(r) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \tag{2.2}$$

und ein Potential mit unendlich hohen Wänden

$$V_c(r) = 0 \text{ für } r < R_c, \quad V_c(r) = \infty \text{ für } r \geq R_c \tag{2.3}$$

Der Hamiltonian gehorcht einem Skalierungsgesetz und Koordinaten, Energien und die Temperatur lassen sich ausdrücken in den Einheiten

$$r_0 = (q^2/\varepsilon)^{1/3} \alpha^{-1/3}, \quad E_0 = (q^2/\varepsilon)^{2/3} \alpha^{1/3} \tag{2.4}$$

wobei $\alpha = m\omega_0^2/2$. Der Hamiltonian wird zu

$$H = \sum_{i=1}^{N} r_i^2 + \sum_{j>i}^{N} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.5}$$

dessen Grundzustände nicht von ω_0 abhängen. Die Stärke des einschließenden Potentials ω_0 definiert die Länge und die Temperatur des Systems. Ein parabolisches Potential wirkt ähnlich einem neutralisierenden Hintergrund von Ladungen. Also wird eine Änderung von N im Mittel nicht die Dichte des Systems ändern, die durch ω_0 bestimmt ist. Im Falle des Wand-Potentials wird $\alpha = (q^2/\varepsilon)N^{3/2}(2R_c)^{-3}$. Für das Finden der Grundzustände wurde eine Monte Carlo Simulation durchgeführt. Die Ausgangskonfiguration war ein perfektes hexagonales Wigner-Gitter. Der echte Grundzustand wurde dann als Gleichgewichtszustand bei einem Monte-Carlo-Lauf bei Temperatur gleich null erhalten. Um sicher zu gehen, daß das globale Minimum erreicht wurde, wurde das System aufgeheizt und wieder abgekühlt. Die Teilchenzahl wurde erhöht, indem an einer zufälligen Position ein Teilchen eingefügt wurde, und erneut der Gleichgewichtszustand berechnet wurde.

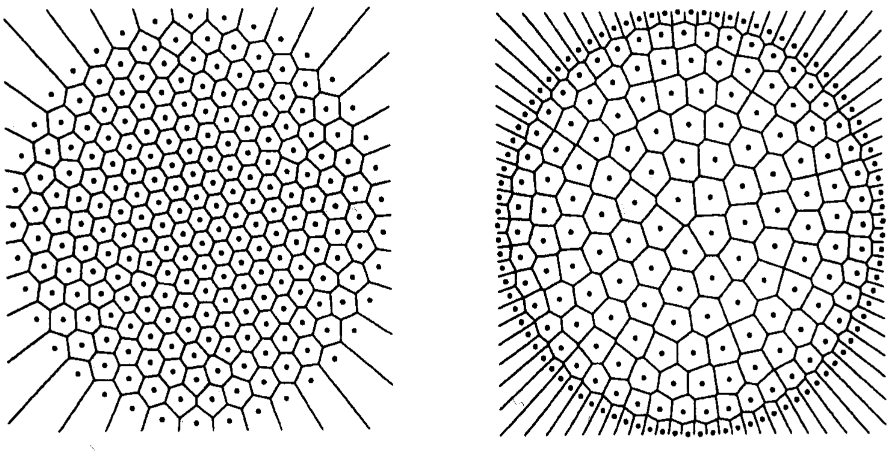


Abbildung 2.1: Abbildung aus [27].

In Abbildung 2.1 sieht man Gleichgewichtszustände für $N = 230$ Teilchen. Um die lokale Struktur und Dichte zu untersuchen, wurden Voronoi-Konstruktionen eingefügt. Das sind geometrische Konstruktionen, die die minimale Fläche für jedes Teilchen bestimmen. Es werden die Mittelsenkrechten auf allen Verbindungslinien eines Teilchens zu seinen Nachbarn konstruiert (ganz ähnlich wie für die Konstruktion der ersten Brillouin-Zone in der Festkörperphysik). Für niedrige Temperaturen entsteht eine Schalen-Struktur. Es wurde eine Tabelle ähnlich des Periodensystems der Elemente aufgestellt. Für große Systeme wie in der Abbildung ist die Struk-

1	1	6	1,5	11	3,8	16	1,5,10	21	1,7,13	26	3,9,14
2	2	7	1,6	12	3,9	17	1,6,10	22	2,8,12	27	4,9,14
3	3	8	1,7	13	4,9	18	1,6,11	23	2,8,13	28	4,10,14
4	4	9	2,7	14	4,10	19	1,6,12	24	3,8,13	29	5,10,14
5	5	10	2,8	15	5,10	20	1,7,12	25	3,9,13	30	5,10,15

Tabelle 2.1: Für $N = 1 \ldots 30$ Teilchen Schalen-Struktur $(N_1, N_2, \ldots)$ bei parabolischem Einschluß. Werte aus [27].

tur der inneren Schalen sehr nahe an einem hexagonalen Gitter. Es gibt also einen Wettstreit zwischen der Wigner-Gitter-Struktur und der Ordnung in Schalen. Die erstere ist die bevorzugte Ordnung von Punktteilchen in der Ebene, während letztere durch das rotationssymmetrische Potential bewirkt wird. Bei großen Systemen sind die äußeren Schalen immer mit gleich vielen Teilchen gefüllt

$$N = 230: \; 1, 6, 12, 18, 23, 25, 34, 37, 37, 37$$

Es wurden auch Regeln für die Schalen-Füllung gefunden. So übersteigt die Anzahl der Teilchen in der innersten Schale niemals den Wert 5. Für $N < 50$ hat die zweite Schale nie mehr als 10 Teilchen und für $N \geq 50$ nie mehr als 11. Wenn alle Schalen bis zu ihrem Maximum gefüllt sind, entsteht eine neue Schale mit einem Teilchen im Mittelpunkt wenn man ein Teilchen hinzufügt. Die Suche eines globalen Minimums bei großen Teilchenzahlen ist nicht einfach. So beträgt z.B. für $N = 14$ der Abstand der Energien des globalen Minimums (4,10) und des lokalen Minimums (5,9) nur 0.06%. Aus diesem Grund gibt es auch keine großen Sprünge in der Funktion $E(N)$. Trotzdem werden magische Zahlen N beobachtet, die eine niedrigere Energie erlauben als andere.

Es wurden auch Phasenübergänge untersucht. Dazu wurde das System aufgeheizt und in einem neuen Monte-Carlo-Lauf das Gleichgewicht hergestellt. Dann wurde die mittlere potentielle Energie berechnet, ebenso wie radiale Abweichung

$$\langle u_R^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2)/a^2 \tag{2.7}$$

und die quadratischen Abweichungen der Winkel innerhalb einer Schale

$$\langle u_a^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\langle (\phi_i - \phi_j)^2 \rangle - \langle \phi_i - \phi_j \rangle^2 \right) / \phi_0^2 \tag{2.8}$$

und analog zwischen benachbarten Schalen. Dabei werden nur relative Winkelabweichungen berücksichtigt, da das System als ganzes rotieren kann. Für niedrige Temperaturen wurde gefunden, daß die Abweichungen nicht gleichförmig sind. Die Winkelabweichung ist typischerweise größer für kleine Systeme und auch für die äußeren Schalen bei großen Systemen. Bei hohen Temperaturen verhalten sich die Teilchen "flüssig", sie bewegen sich frei innerhalb ihrer Schale und springen zu benachbarten Schalen. Es muß also einen Temperaturbereich geben, wo das System sein Verhalten ändert. Für große Systeme ändern sich radiale und Winkelabweichungen bei etwa der gleichen Temperatur. Hier gibt es scheinbar keine Anzeichen von Rotation der Schalen gegeneinander. Diese Systeme verhalten sich mehr wie unendlich ausgedehnte. Für kleine Systeme jedoch machen die Abweichungen zwischen Schalen bei viel kleineren Temperaturen einen Sprung als die radialen Abweichungen. Das demonstriert die Möglichkeit von relativer Schalen-Rotation bevor das Schmelzen insgesamt einsetzt. Bei mehrschaligen Systemen wird ein Schmelzen bei unterschiedlichen kritischen Temperaturen je Schale beobachtet.

Ein ähnliches System nur mit äußerem Magnetfeld untersuchen Date et al. [31]. Sie konzentrieren sich auf den Übergang von $N = 5$ zu $N = 6$ Teilchen und zeigen analytisch, daß dieser Übergang unabhängig vom einschließenden Potential r^γ und der Form der Wechselwirkung $1/r^\nu$ ist. Genauso ist die Schalenstruktur unabhängig von einem durch das äußere Magnetfeld erzeugten Gesamtdrehimpuls J wie man in Abbildung 2.2 sieht. Hier erkennt man auch gut eine "Breite" der Schalen. Date et al. beobachten, daß für $N = 6, 19, 37$ diese Breite gegen Null geht, also die Schalen fast genau kreisförmig sind.

2.2 ...mit quantenmechanischen Teilchen

Filinov, Bonitz und Lozovik untersuchen Wigner-Kristallisation von Elektronen in Quantenpunkten ohne äußeres Magnetfeld, aber bei endlicher Temperatur. Sie ge-

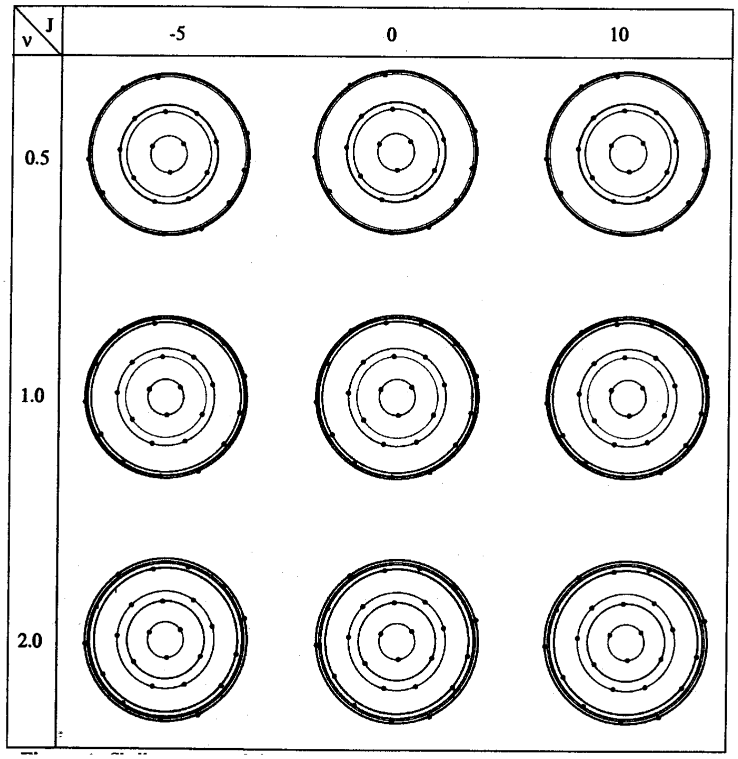


Abbildung 2.2: Schalenstruktur für 25 Teilchen [31].

hen aus von dem Hamiltonian

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m \omega_0^2 r_i^2 + \sum_{i<j}^{N} \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.9}$$

und skalieren dann das System mit einer Länge r_0 gegeben durch

$$\frac{e^2}{\varepsilon r_0} = \frac{1}{2} m \Omega^2 r_0^2 \tag{2.10}$$

und einer Energie gegeben durch

$$E = \frac{e^2}{\varepsilon r_0} \tag{2.11}$$

Sie erhalten einen dimensionslosen Hamiltonian

$$H = \frac{n^2}{2} \sum_{i=1}^{N} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N} r_i^2 + \sum_{i<j}^{N} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.12}$$

wobei $n = \sqrt{2}\, l_0^2/r_0^2 = \sqrt{\frac{a_B}{r_0}}$, $a_B = \frac{\varepsilon \hbar^2}{m e^2}$ der effektive Bohr-Radius ist, und $l_0^2 = \hbar/m\omega_0$ die Ausdehnung der Wellenfunktion im Grundzustand. Sie definieren ein $r_s = r_0/a_B = 1/n^2$ welches man als mittlere Elektronendichte oder auch als Verhältnis von kinetischer zu potentieller Energie betrachten kann. In Werten von diesem dimensionslosen Parameter werden Phasenübergänge auszudrücken sein. Der Hamiltonian (2.12) wird mit einer Pfadintegral-Monte-Carlo (PIMC) Simulation untersucht für große Bereiche der Parameter n, T und N. Die Simulation liefert

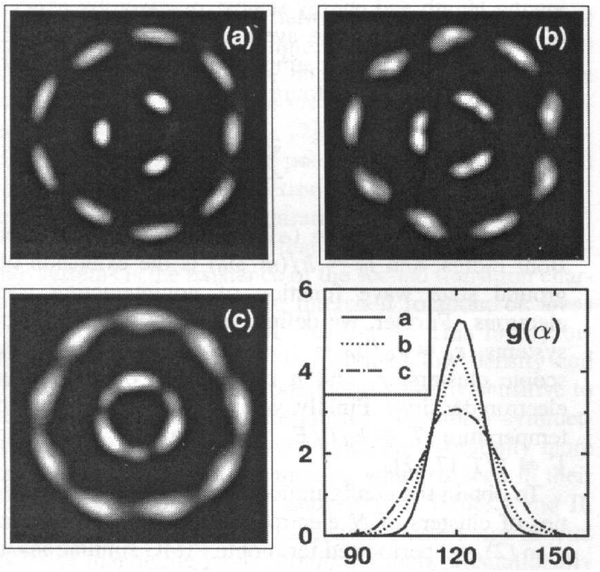


Abbildung 2.3: Cluster mit 12 Elektronen (a) in der Phase mit geordneter Orientierung ($n = 0.01$), (b) bei Schmelzen der Orientierung ($n = 0.14$), (c) in der Phase mit ungeordneter Orientierung ($n = 0.02$). Das Bild rechts unten zeigt die Winkel-Paarkorrelation für die innere Schale. Abbildung aus [36].

"Schnappschüsse" der Elektronenverteilung wie in Abbildung 2.3 zu sehen. Man sieht deutlich die Schalen-Struktur. Es wurden die gleichen Strukturen gefunden wie für die klassischen Systeme aus dem vorigen Abschnitt. Cluster in denen die Anzahl der Elektronen in der äußeren Schale ein Vielfaches der in der inneren Schale ist, haben die höchste Symmetrie und dadurch besondere Eigenschaften. Beispiele dieser magischen Zahlen sind $N = 10, 12, 16, 19$. Bei diesen Clustern wurde eine höhere Schmelztemperatur als bei den anderen gefunden. Der Cluster mit $N = 19$ ist besonders stabil gegenüber Schalen-Rotation, da das Verhältnis der Teilchenzahlen in den drei Schalen optimal für die Bildung eines hexagonalen Gitters ist. Ganz anders ist die Situation beim radialen Schmelzen: hier ist die Temperatur für magische Cluster kleiner als für nicht-magische. Diese Eigenschaften wurden auch für klassische Teilchen von Schweigert und Peeters [29, 39] gefunden. Um die Phasenübergänge zu quantifizieren wird die Winkelabweichung in der Form

$$u_\phi = \sqrt{\langle \delta\phi^2 \rangle} = \frac{2}{m_1 m_2} \sum_i^{m_1} \sum_j^{m_2} \sqrt{\frac{\langle |\phi_j - \phi_i|^2 \rangle}{\langle |\phi_j - \phi_i| \rangle^2} - 1} \tag{2.13}$$

und die radiale Abweichung in der Form

$$u_r = \sqrt{\langle \delta r^2 \rangle} = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{j \le j}^{N} \sqrt{\frac{\langle r_{ij}^2 \rangle}{\langle r_{ij} \rangle^2} - 1} \tag{2.14}$$

verwendet. In der Umgebung der Phasenübergänge zeigen diese Größen einen starken Anstieg wie in Abbildung 2.4 zu sehen ist. Die Phasenübergänge sind zusammengefasst in Abbildung 2.5 wo man nochmals die starke Abhängigkeit von der Teilchenzahl, d.h. magischen Zahlen erkennt.

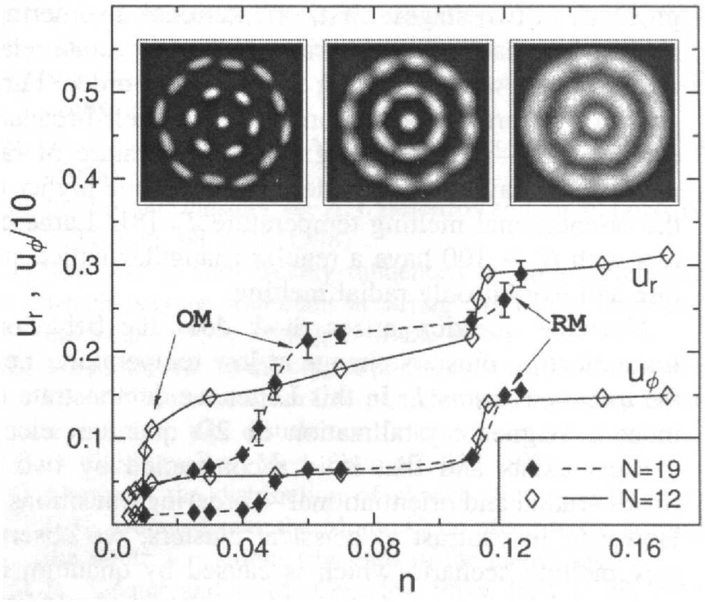


Abbildung 2.4: Relative Winkel- und Radialabweichungen für $N = 12$ und $N = 19$ aufgetragen über der Dichte n. Die Bilder zeigen die Phasenübergänge für $N = 19$ bei $n = 0.025$, $n = 0.06$ und $n = 0.14$. OM: Orientierungs-Schmelzen, RM: radiales Schmelzen. Abbildung aus [36].

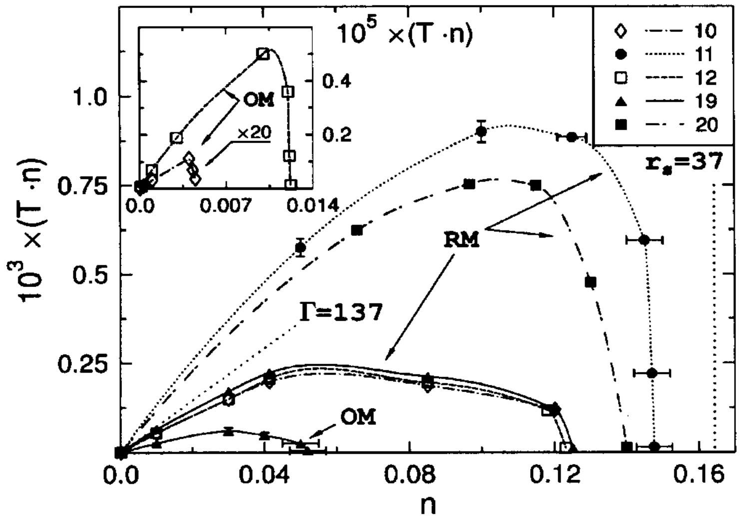


Abbildung 2.5: Phasendiagramm des mesoskopischen 2D Wigner-Kristalls. Die gepunkteten Linien deuten die seit längerer Zeit bekannten Schmelz-Übergänge für einen *makroskopischen* Wigner-Kristall an. Abbildung aus [36].

2.3 ...in Quantenpunkten mit Magnetfeld

Reimann et al. studieren Quantenpunkte in einem Magnetfeld mit der Current-Spin-Density-Functional (CSDF) Methode. Sie vergleichen ihre Ergebnisse mit experimentellen Befunden wo die Magnetfeld-Abhängigkeit des chemischen Potentials durch Einzelelektron-Kapazitäts-Spektroskopie erhalten wurde: Einzelne Elektronen tunneln durch die Elektroden in den Quantenpunkt wenn das chemische Potential $\mu(N, B)$ gleich der Fermi Energie in einer Elektrode ist. Dabei werden deutliche Stufen in $\mu(N, B)$ gesehen, die unterschiedliche Bereiche des Magnetfeldes abgrenzen. Diese Phasenübergänge werden mit einer Umordnung des Grundzustandes innerhalb des Quantenpunktes in Verbindung gebracht. Der Punkt, wo eine komplette Polarisierung der Elektronen vorliegt, markiert den Anfang der sogenannten Maximum-Density-Droplet (MMD) Phase. Dieser neue Zustand ist ein homogener Tropfen, in dem die Dichte nahezu konstant bei dem maximalen im niedrigsten Landau-Niveau erreichbaren Wert $\varrho_0 = 1/2\pi l_B^2$ ist. Die Spin-polarisierten Elektronen besetzen benachbarte Drehimpulszustände, was die Elektronendicht maximiert. Die Stabilität des MDD wird bestimmt durch Wettstreit zwischen kinetischer und einschließender Energie und der Coulombabstoßung der Elektronen. Erstere würde ein MDD bis zu unendlich starkem Magnetfeld favorisieren. Lediglich der Radius würde schrumpfen. Dies verhindert jedoch die Coulombabstoßung: Bei einem scharf definierten Punkt ordnen sich die Elektronen um. Chamon und Wen fanden mit Hartree-Fock-Simulationen [28], daß sich am Rand eines Quanten-Hall-Tropfens mit Füllfaktor eins ein Streifen bzw. Ring von dem MDD abspaltet. Als Beispiel

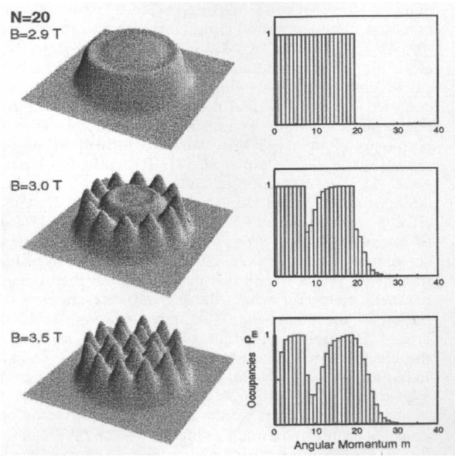


Abbildung 2.6: Dichte für 20 Elektronen kurz vor der Umordnung (oben), beim Abspalten des Chamon-Wen-Randes (mitte) und vollständig umgeordnet (unten). Rechts die zugehörige Drehimpulsorbitalbesetzung. Man beachte, daß die Besetzung hier auch Werte zwischen 0 und 1 annimmt. Abbildung aus [33].

sehen wir uns Abbildung 2.6 an. Bei einem Feld von $B = 2.3$T ist ein einzelner Spin im Zentrum vorhanden. Bei Feldern $B > 2.4$T sind die Elektronen komplett polarisiert. Kurz nach dem Polarisierungspunkt bildet sich das MDD. Alle Elektronen sind im niedrigsten Landau-Niveau, die Drehimpulsorbitale $m = 0, 1, \ldots, N-1$ sind besetzt. Für $N = 20$ ist das MDD stabil (nur die Dichte wächst) bis $B = 2.9$T. Dann spaltet sich der Chamon-Wen-Rand ab, die Rotationssymmetrie im Ruhesystem ist gebrochen. Ein Plot des Gesamt-Wahrscheinlichkeitsstroms $\vec{\jmath}(x, y)$ zeigt Wirbel, die an den Dichtemaxima des Randes lokalisiert sind. Für höhere Werte findet Lokalisierung auch im Inneren des Tropfens statt. Diese Effekte sind nicht beschränkt auf Tropfen mit kleinen Elektronenzahlen. Reimann et al. präsentieren ein Phasendiagramm in B und N mit den vier Phasengrenzen vollständige Polarisierung, Bildung des MDD, Chamon-Wen-Rand und vollständige Lokalisierung für bis zu 42 Teilchen. Ähnliche Ergebnisse präsentieren Müller und Koonin [30].

2.4 ...mit Laughlin-Ansatz

Manninen et al. schlagen einen neuen analytischen Ansatz für die Wellenfunktion vor, der nach ihren Worten ein intuitiveres Bild als die komplizierte Jain-Konstruktion erlaubt, wenn man von dem Laughlin-Zustand $L_q = qN(N-1)/2$ zu dem Zustand mit einem "Quasi-Loch" oder "Wirbel" $L = qN(N-1)/2 + N$ übergeht. Ansatz-Funktionen für $L = L_q + M$ können konstruiert werden, indem man den Laughlin-Jastrow-Faktor mit einem total symmetrischen Polynom der Ordnung M in den z_k multipliziert (siehe dazu zuerst Kapitel 4). Für $M = 1$ geht das nur mit $\sum z_k$ was einer uninteressanten Schwerpunkt-Anregung des Laughlin-Zustandes entspricht. Für $2 \leq M \leq N$ schlagen Manninen et al. als Ansatz vor

$$\psi_{LBP}(L_q + M) = S \prod_i^M (z_i - z_0) \phi_L(q) \tag{2.15}$$

wobei S das Produkt symmetrisiert und $z_0 = \sum z_k/N$ die Koordinate des Schwerpunktes ist ($\phi_L(q)$ ist die bekannte Laughlin-Funktion, s. Kapitel 4). Das Schöne an dieser Funktion ist, daß sie Visualisierung von Elektronenlokalisation erlaubt. Dazu sucht man Maxima der N-Punkt-Korrelationsfunktion

$$|\psi(z_1, \ldots, z_N)|^2 \tag{2.16}$$

Laughlin zeigte für seine Wellenfunktion, daß dies äquivalent zur Suche nach der Gleichgewichtsposition von klassischen Teilchen ist, die mit einem logarithmischen Potential wechselwirken. Die Lokalisierung wird stärker mit wachsendem q was den Laughlin-Zustand ähnlicher einem Kristall werden läßt. Der Ansatz (2.15) erlaubt eine Untersuchung der Gleichgewichtspositionen für beliebige L.

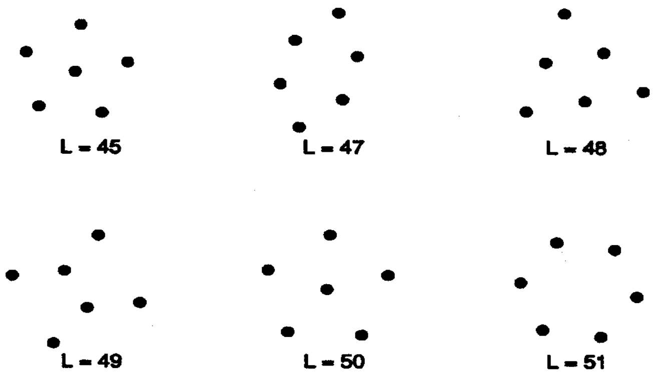


Abbildung 2.7: Geometrie des "Wigner-Moleküls" aus 6 Elektronen [37].

In Abbildung 2.7 sieht man die Fälle $L = 45$ bis $L = 51$ ($L = 46$ entspricht einer Schwerpunkt-Anregung). Der Fünfer-Ring bei $L = 50$ und der Sechser-Ring bei $L = 51$ treten wie erwartet auf (siehe dazu die Beschreibung der speziellen magischen Zahlen in Kapitel 3). Generell besteht der äußere Ring aus ebensovielen Elektronen, wie Potenzen im Polynom aus (2.15) vorhanden sind. Der nächste niedrige Energie-Zustand wird demnach bei $L_q + n$ erwartet, wobei n die Anzahl der Elektronen im äußeren Ring ist. Manninen et al. präsentieren auch Plots der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung zu den obigen L, wo man ebenfalls die speziellen Eigenschaften der 5er- und 6er-Symmetrie sieht. Sehr ähnliche Plots werden wir gleich in Kapitel 3 vorstellen.

Kapitel 3

Das Kombinatorische Modell

Wir haben in den vorigen Kapiteln verschiedene Methoden kennengelernt, Quantenpunkte und Wigner-Kristallisation zu behandeln. Eine weitere Methode wird in diesem Kapitel vorgestellt. Sie unterscheidet sich von den anderen hauptsächlich dadurch, daß sie sehr einfach ist und für Berechnungen keine Großrechenanlagen benötigt. Außerdem werden wir so viel "harter" Physik wie möglich über Bord werfen und uns auf die übrig bleibende Kombinatorik konzentrieren. Alle Methoden – so komplex oder einfach sie auch sein mögen – Vielteilchenprobleme wie Quantenpunkte zu behandeln, haben gemeinsam, daß Information weggelassen wird. Eine entscheidende Frage wird also sein, welche Information wir in dieser Methode weglassen werden, um die Berechnungszeit in Grenzen zu halten. Denn die Kriterien für eine gute Methode sind (a) die Rechenzeit möglichst niedrig zu halten und deshalb (b) für die spezielle Fragestellung möglichst uninteressante Information wegzulassen. Leider haben fast alle Methoden irgendwo etwas mit Permutationen zu tun und es tauchen Fakultäten von wichtigen Größen auf. Das bedeutet, man bekommt eine exponentielle Entwicklung der Rechenzeit oder des Speicherplatzbedarfs in Abhängigkeit von z.B. der Teilchenzahl. Das ist auch bei der kombinatorischen Methode nicht anders. Aber trotzdem haben wir bei moderaten Teilchenzahlen etwa kleiner als 10 sehr viel kürzere Rechenzeiten als Methoden, die für unsere Fragestellung vergleichbare Ergebnisse liefern.

3.1 Fester Gesamtdrehimpuls

Eine Motivation, diese Methode zu entwickeln war, die magischen Zahlen in einfacher Weise durch Kombinatorik zu erklären. Wie wir in Abschnitt 1.5 schon kurz gesehen haben, ergeben sich lokale Minima der Gesamtenergie bei bestimmten Werten des Gesamtdrehimpulses J. Diese bestimmten Werte sind abhängig von der Teilchenzahl N und zwar nach der Formel

$$J_{\mathrm{mag}}(N,k) = \frac{1}{2}(N-1)N + kN, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{3.1}$$

Die Werte von J bei denen die lokalen Minima auftreten sind also äquidistant und können durch k abgezählt werden. J_{mag} sind die sogenannten magischen Zahlen (des Gesamtdrehimpulses).

Wie erkären wir das? Wir werden zunächst ein paar Vorüberlegungen treffen und uns dann wieder den magischen Zahlen zuwenden. Zuerst einmal sehen wir uns an, wie der Gesamtdrehimpuls zustandekommt. Wir machen auch in diesem Modell wie in vielen anderen die Annahme, daß die Elektronen durch ein starkes Magnetfeld spinpolarisiert sind. Außerdem gilt das Pauliprinzip, sodaß also ein Drehimpulsorbital höchstens von einem Elektron besetzt wird. Der Einzeldrehimpuls des i-ten Teilchens ist ein Eigenwert

$$j_i = 0, 1, 2, \dots \tag{3.2}$$

des Drehimpulsoperators und der Gesamtdrehimpuls ist die Summe dieser Einzeldrehimpulse

$$J = \sum_{i=1}^{N} j_i \tag{3.3}$$

Ein Zustand des Systems ist also völlig charakterisiert durch einen Vektor

$$[j_1, \dots, j_N], \quad 0 \leq j_0 < j_1 < \dots < j_N \tag{3.4}$$

der Einzeldrehimpulse.

Wir wollen in diesem Abschnitt Zustände mit vorgegebenem, festem J betrachten, und es ist klar, daß es für einunddasselbe J viele verschiedene Zustände der obigen Form geben kann. Wir werden es also mit dem aus der Zahlentheorie bekannten Problem zu tun bekommen, eine natürliche Zahl (in unserem Fall J) als Summe von N kleineren natürlichen Zahlen (also den j_i's) darzustellen. Das sind keine guten Aussichten, weil die Anzahl der Möglichkeiten, das zu tun exponentiell mit J und N anwächst und wir auch Zustände mit großem J und N betrachten wollen. Ein paar Zahlen zu diesem Thema finden sich in Anhang A.3.

Wie wir in den Abschnitten 1.3 und 1.4 gesehen haben, ist der Gesamtzustand des Systems die Summe der gewichteten Einzelzustände, die Slaterdeterminanten von Einzelelektronenzuständen sind. Hierbei geht in die Gewichtung die Wechselwirkung zwischen den Einzelzuständen ein. In unserem Modell werden wir diese Gewichtung bereits zu einem großen Teil vor den eigentlichen Berechnungen vornehmen, indem wir Basiszustände wählen, in die Wechselwirkungseffekte eingebaut sind. Außerdem werden wir die Wechselwirkung zwischen den Basiszuständen in einer besonders einfachen Art und Weise behandeln.

Dazu beobachten wir, daß ein Konfigurations-Vektor wie in (3.4) definiert, Abschnitte enthalten kann, in denen die j_i's aufeinanderfolgende Zahlen sind:

$$[\dots, j_i, j_i + 1, \dots, j_i + n - 1, \dots], \quad i \geq 1, i + n - 1 \leq N \tag{3.5}$$

So einen Abschnitt aus n aufeinanderfolgenden besetzten Orbitalen, wobei der Platz links und rechts davon unbesetzt ist, nennen wir Block. Ein Block ist vollständig charakterisiert durch zwei Zahlen, nämlich durch die Anzahl n der besetzten benachbarten Orbitale und durch den Mittelwert der Einzeldrehimpulse

$$\bar{\jmath} = (j_i + j_i + 1 + \dots + j_i + n - 1)/n = j_i + \frac{1}{2}(n-1) \tag{3.6}$$

den wir als den (Eigen-)Drehimpuls des Blocks bezeichnen wollen. Für $\bar{\jmath}$ kommen nur ganze und halbzahlige Werte vor. Es ist klar, daß man nun jede Konfiguration auch in der Block-Dekomposition eindeutig darstellen kann

$$[(n_1, \bar{\jmath}_1)(n_2, \bar{\jmath}_2) \dots (n_l, \bar{\jmath}_l)] \tag{3.7}$$

wobei $1 \leq l \leq N$ ist, d.h. eine Konfiguration besteht mindestens aus einem Block und höchstens aus N Blöcken. Um es noch etwas zu veranschaulichen: z.B. hat die Konfiguration

$$[1, 3, 4, 5, 6, 9] \equiv [\circ\bullet\circ\bullet\bullet\bullet\bullet\circ\circ\bullet] \equiv [(1, 1)(4, 4.5)(1, 9)]$$

drei Blöcke und kann entsprechend dargestellt werden. Man beachte, daß via der klassischen Relation

$$j \sim r^2 \tag{3.9}$$

Drehimpulsorbital und Bahnradius verbunden sind und deshalb benachbarte Drehimpulsorbitale räumlich benachbarten Bahnen entprechen.

Es liegt nahe, Blöcke als energetisch günstige Konfigurationen zu betrachten. Dadurch daß sie näher beisammen sind, wird zwar scheinbar die Coulombenergie vergößert, aber das wird relativiert durch den Effekt der gemeinsamen Kreisbewegung. So kann man sich etwa klassisch vorstellen, daß zwei Elektronen, die sich auf zwei gegenüberliegenden Punkten eines Kreises umeinander bewegen, insgesamt eine kleinere Coulombabstoßung erfahren, als wenn sie sich auf Einzelorbitalen mit unterschiedlicher Geschwindigkeit bewegen. Außerdem sind Spin-Spin- und Spin-Bahn-Kopplung innerhalb eines Blocks stärker als zwischen verschiedenen Blöcken, sodaß wir also insgesamt einen Block als ein Quasiteilchen – einen zumindest für einige Zeit stabilen Zustand – betrachten können. Wir gehen in dem Modell aus von folgender

HYPOTHESE: *Die Elektronen innerhalb eines Blocks $(n, \bar{\jmath})$ sind stark genug durch Spin-Spin- und Spin-Bahn-Wechselwirkungen gekoppelt, daß sie ein Quasiteilchen bilden mit Ladung n und Drehimpuls $\bar{\jmath}$. Die entsprechenden Kopplungen zwischen Blöcken sind dagegen vernachlässigbar.*

Das ist also die Basis in der wir die folgenden Berechnungen vornehmen wollen. In diese eingebaut sind bereits Spin-Effekte. Es bleiben die Coulomb-Effekte zu berücksichtigen. Jedes Quasiteilchen hat sozusagen eine Selbstenergie mit der es zur Gesamtenergie beiträgt. Wir berechnen diese Selbstenergie $E_{(n,\bar{\jmath})}$ eines Quasiteilchens klassisch: wir stellen uns die n Elektronen äquidistant auf einem Kreisring plaziert vor und berechnen die Coulombabstoßungseergie zwischen ihnen. Der Radius dieses Kreisrings ist wegen (3.9) gegeben durch die Wurzel aus dem Drehimpuls des Quasiteilchens $r = \sqrt{\bar{\jmath}}$. Die potentielle Energie $E_{(n_i,\bar{\jmath}_i)(n_k,\bar{\jmath}_k)}$ zwischen Blöcken wird berechnet, indem man die Coulombenergie zwischen zwei solchen Kreisringen berechnet. Wie das genau funktioniert ist in Anhang A.2 beschrieben. Wichtig ist hier nur, daß unsere Annahme eingebaut ist, daß die Selbstenergie eines Blocks aus n Elektronen niedriger ist, als potentielle plus Selbstenergie von mehreren Blöcken auf die die n Elektronen verteilt sind. Denn dadurch wird ein Ordnugsschema definiert, nach welchem die Konfigurationen ihrer Wichtigkeit nach geordnet werden können.

Nun können wir mit Berechnungen der Energien von Quantenpunkten mit vorgegebenem N und J anfangen, um magische Zahlen als Minima davon zu erhalten. Dazu berechnen wir zuerst alle Konfigurationen aus N Teilchen, die den festen Gesamtdrehimpuls J haben. Ein Algorithmus dazu ist in Anhang A.3 beschrieben. Zu jeder Konfiguration wird die Block-Dekomposition berechnet und damit die Gesamtenergie, die sich aus den Selbstenergien der Blöcke und den gegenseitigen potentiellen Energien zusammensetzt

$$E_m = E[(n_1, \bar{\jmath}_1) \dots (n_l, \bar{\jmath}_l)] = \sum_{i=1}^{l} E_{(n_i,\bar{\jmath}_i)} + \sum_{i=1}^{l} \sum_{k=i+1}^{l} E_{(n_i,\bar{\jmath}_i)(n_k,\bar{\jmath}_k)} \tag{3.10}$$

Nun nehmen wir an, daß der normierte Grundzustand des Systems als eine Linearkombination geschrieben werden kann

$$|\Psi\rangle = \sum_m S_m \exp\left(-\frac{1}{2}\beta E_m\right) |\Psi_m\rangle \tag{3.11}$$

wobei die $|\Psi_m\rangle$ ein orthonormales System bilden, d.h. jede Konfiguration wird mit ihrem Boltzmann-Faktor und einem Symmetriefaktor gewichtet. Die Wahrscheinlichkeit einer Konfiguration ist

$$p_m = S_m \exp(-\beta E_m) \tag{3.12}$$

Die inverse Temperatur β kann berechet werden aus der Normierungsbedingung der Konstanten

$$Z = \sum_m S_m \exp(-\beta E_m) = 1 \tag{3.13}$$

Dies zu berechnen ist äquivalent zu dem Problem, die Nullstelle des Polynoms

$$\left(\sum_m S_m x^{E_m} \right) - 1 \tag{3.14}$$

im Intervall $[0, 1]$ zu finden, wobei $x = \exp(-\beta)$ ist. Das geht sehr schnell und mit beliebiger Genauigkeit. Die inverse Temperatur β kann aber auch als äußerer Parameter des Systems behandelt werden, was verschiedene Werte der Normierungskonstanten zulassen würde.

Die S_m sind Symmetriefaktoren, die abzählen, wie oft die entsprechende Konfiguration m "wirklich" vorkommt. Die Elektronen sind ununterscheidbar, und deshalb sind auch Konfigurationen ununterscheidbar, wo Elektronen Plätze getauscht haben. In unserem Konfigurations-Vektor sind alle Teilchen unterscheidbar. Deshalb müssen wir sie ununterscheidbar machen, indem wir alle Möglichkeiten des Platztauschs zulassen und zählen, wieviele Möglichkeiten das sind. Ein Zustand von N Elektronen, über die antisymmetrisiert wird, hat einen Symmetriefaktor von $N!$, das ist die Anzahl der Permutationen von N unterscheidbaren Teilchen auf N Plätzen. Aber in unserem Modell betrachten wir die Elektronen innerhalb eines Blocks als unabhängig von den Elektronen in den anderen Blöcken. Wir wollen, daß die Gewichtung von Konfigurationen mit wenigen großen Blöcken bzw. vielen kleinen Blöcken nach unseren oben beschriebenen Annahmen unterschiedlich ausfällt. Ein gemeinsamer Faktor $N!$ für alle Konfigurationen kann nicht unterscheiden zwischen vielen und wenigen Blöcken. Welche anderen Möglichkeiten sind denkbar?

Naheliegend ist, unsere Quasiteilchen, die Blöcke, als unterscheidbar anzusehen, und die Elektronen darin als ununterschiedbar, also jeden Block getrennt zu antisymmetrisieren

$$S_m = \prod_{i=1}^{l} n_i! \tag{3.15}$$

Dabei zählen wir Permutationen innerhalb eines Blocks zuviel, die Rotationen eines Kreisrings mit n äquidistant darauf verteilten Elektronen um $2\pi k/n$, $k = 1, 2, \ldots, n-1$ entsprechen. Diese sind in unserem Bild äquivalent, da sowohl die Selbstenergie eines Blocks als auch die potentielle Energie zwischen Blöcken rotationsinvariant berechnet werden. Wir müssen also pro Block durch n_i teilen

$$S_m = \prod_{i=1}^{l} (n_i - 1)! \tag{3.16}$$

Irgendwie müssen wir noch die Ununterscheidbarkeit aller Elektronen unterbringen. Wenn man dazu alle Möglichkeiten berechnet, die N Elektronen auf die l Blöcke aufzuteilen

$$\binom{N}{n_1}\binom{N-n_1}{n_2}\binom{N-n_1-n_2}{n_3}\cdots\binom{n_l}{n_l} =$$

$$= \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \frac{(N-n_1)!}{n_2!(N-n_1-n_2)!} \frac{(N-n_1-n_2)!}{n_3!(N-n_1-n_2-n_3)!} \cdots \frac{n_l!}{n_l!(n_l-n_l)!} =$$

$$= \frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_l!} \tag{3.19}$$

und (3.15) damit multipliziert, hat man wieder $N!$, also alle Permutationen, was wir vermeiden wollten. Wenn man die Elektronenzahl pro Block jedoch nicht fest setzt, so hat man $\binom{N}{l}$ Möglichkeiten, die N ununterscheidbaren Elektronen auf die l unterscheidbaren Blöcke aufzuteilen. Die Ergebnisse mit dem Symmetriefaktor

$$S_m = \binom{N}{l} \prod_{i=1}^{l} (n_i - 1)! \tag{3.20}$$

sind sehr zufriedenstellend, wir ziehen aber noch eine andere Möglichkeit in Betracht.

Wenn wir schon mit Symmetrien zu tun haben, lohnt ein Blick in die Gruppentheorie. Wenn wir ausgehen von N freien Elektronen, die die Symmetrie der Ordnung $N!$ der Permutationsgruppe S_N haben, dann ist die Aufteilung auf Blöcke eine Einschränkung dieser Symmetrie auf die entsprechende Konjugationsklasse. Der Symmetriefaktor ist dann die Ordnung oder Größe dieser Konjugationsklasse. Seien N Elektronen auf i_1 1er-Blöcke, i_2 2er-Blöcke, ..., i_k $k$er-Blöcke aufgeteilt, dann ist

$$|C_{i_1 i_2 \dots i_k}| = \frac{N!}{i_1! i_2! \dots i_k! \; 1^{i_1} 2^{i_2} \dots k^{i_k}} \tag{3.21}$$

Den letzten Faktor im Nenner hätten wir auch als $n_1 n_2 \dots n_l$ schreiben können. Neu ist der erste Faktor im Nenner, der offensichtlich etwas mit Permutationen von Blöcken gleicher Teilchenanzahl zu tun hat. Gut gefällt uns hierbei, daß das Herausteilen der diskreten Rotationssymmetrien automatisch eingebaut ist. Weniger gut ist die Ununterscheidbarkeit von Blöcken gleicher Elektronenzahl, und zwar deswegen, weil in unserem Modell alle Blöcke grundsätzlich nach ihrem Eigendrehimpuls unterscheidbar sind.

Nachdem wir nun β und die Zustandssumme Z bestimmt haben, behandeln wir das System als statistisches Ensemble und können sehr einfach Observablen berechnen wie die Energie

$$\langle E \rangle = \partial_\beta \log(Z) = \sum_m p_m E_m \tag{3.22}$$

die spezifische Wärme

$$\langle C \rangle = C_v/\beta^2 = \partial_\beta^2 \log(Z) = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \tag{3.23}$$

und die Entropie

$$S = -\sum_m p_m \log(p_m) \tag{3.24}$$

Wir erwarten in allen diesen Größen lokale Minima bei den magischen Zahlen des Gesamtdrehimpulses und in der Tat zeigen Plots aufgetragen über J genau das Erwartete (siehe Abbildungen 3.1 und 3.2).

Interessant ist hier zu bemerken, wie erfolgreich man ein System aus wenigen Teilchen als statistisches System behandeln kann. Wir interpretieren es hier so, daß sich die Quantenmechanik in einem mesoskopischen System wie dem Quantenpunkt hauptsächlich darin zeigt, daß sie ein rein klassisches System in ein statistisches

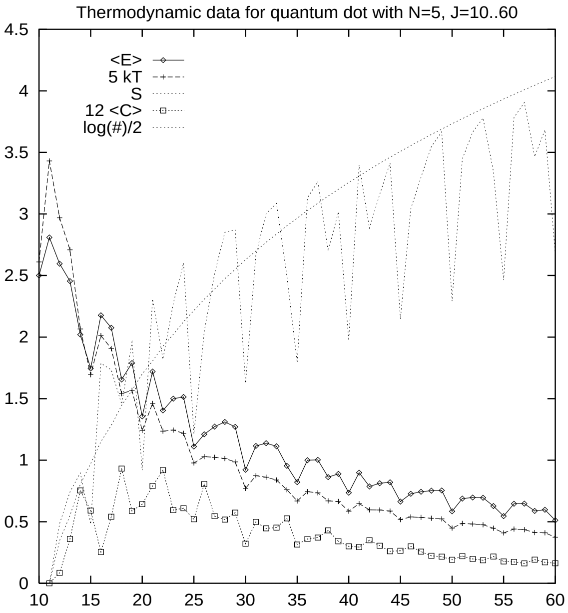


Abbildung 3.1: Thermodynamische Daten für einen parabolischen Quantenpunkt mit $N = 5$ Elektronen und Gesamtdrehimpuls $10 \leq J \leq 60$. Bei den magischen Zahlen hat die Entropie lokale Minima, was auf einen geordneteren Zustand hindeutet. Abbildung aus [19].

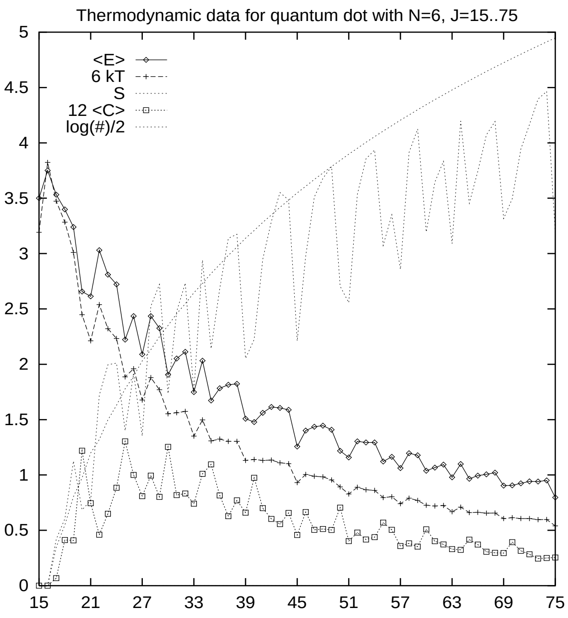


Abbildung 3.2: Thermodynamische Daten für einen parabolischen Quantenpunkt mit $N = 6$ Elektronen und Gesamtdrehimpuls $15 \leq J \leq 75$. Ein Vergleich mit dem Fall $N = 5$ zeigt, daß der $N = 6$-Reihe der magischen Zahlen eine $N = 5$-Reihe überlagert ist. Beide treffen sich bei $J = 45$. Das gleiche gilt auch bei dem $N = 5$ Qantenpunkt, nur ist es dort nicht so ausgeprägt. Abbildung aus [19].

verwandelt. In diesem Sinne behandeln wir auch die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p(R)_{N,J} = \int_0^{2\pi} d\phi \, |\Psi(R,\phi)_{N,J}|^2 \tag{3.25}$$

Man beachte, daß wir hier die Gesamtwellenfunktion $\Psi(R,\phi)_{N,J}$ nicht auszurechnen brauchen. Da der Drehimpuls in einfacher Weise mit dem Bahnradius zusammenhängt, brauchen wir nur die formelle Summe

$$\widetilde{R}(q) = \sum_m p_m \sum_{i=1}^{l_m} \frac{n_i}{N} q^{\bar{\jmath}_i} = \sum_{j=0}^{J} \widetilde{p}_j q^j \tag{3.26}$$

zu betrachten, wobei m für die m-te Konfiguration $[(n_1, \bar{\jmath}_1) \ldots (n_{l_m}, \bar{\jmath}_{l_m})]$ aus l_m Blöcken, d.h. Quasiteilchen q steht. Die radiale Verteilung kann dann abgelesen werden als

$$p(R = \sqrt{j}\,) = \widetilde{p}_j \tag{3.27}$$

Dabei haben wir angenommen, daß das Quasiteilchen $(n, \bar{\jmath})$ an $\bar{\jmath}$ lokalisiert ist. Da es jedoch aus n Elektronen besteht, wird es im Drehimpulsraum "verschmiert" sein. Und zwar symmetrisch um $\bar{\jmath}$ mit einer Breite von n. Mehrere Formen so einer Verschmierung sind denkbar, wie z.B. eine Gauß-Verteilung oder eine Binomialverteilung. Für letzteren Fall erhält man

$$\widetilde{R}(q) = \sum_m p_m \sum_{i=1}^{l_m} \frac{n_i}{N} \sum_{l_i=0}^{2n_i-2} \binom{2n_i-2}{l_i} \frac{1}{2^{2n_i-2}} q^{\bar{\jmath}_i + \frac{1}{2}(l_i+1-n_i)} = \sum_{j=0}^{J} \widetilde{p}_j q^j \tag{3.28}$$

als radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Bevor wir die radialen Wahrscheinlichkeitsverteilungen studieren, wollen wir noch eine wichtige Eigenschaft der magischen Zahlen erklären. Sie zeigt sich, wenn wir das Verhalten für $N \leq 5$ mit dem für $N \geq 6$ vergleichen. Klassisch erwarten wir, daß die Konfiguration mit der niedrigsten Energie für $N \leq 5$ ein Fünfeck ist, während für $N \geq 6$ es ein Fünfeck mit besetztem Mittelpunkt sein sollte. Jedoch ist bei den sogenannten speziellen magischen Zahlen die Konfiguration viel weniger symmetrisch. Diese speziellen magischen Zahlen tauchen auf, wenn in der Formel für die magischen Zahlen (3.1) $k = (N-1)k'$, $k' = 1, 2, \ldots$ ist. Die kleinste nichttriviale spezielle magische Zahl für $N = 5$ ist $J(5,4) = 30$ und für $N = 6$ ist das $J(6,5) = 45$. Die numerische Analyse zeigt, daß um diese Zahlen herum $N-1$-fache Symmetrie mit einem Elektron in der Mitte die bevorzugte Symmetrie ist, während genau bei der speziellen magischen Zahl und $N \geq 6$ Symmetrie sogar noch weniger vorhanden ist. Man spricht von einem "flüssigen" Zustand (in Analogie zu Laughlins Quantentropfen) und sagt, daß dieser Quantenpunkt mit den Werten des Gesamtdrehimpulses $J = (N, (N-1)k')$ den Füllfaktor

$$\nu = \frac{N(N-1)}{2J} = \frac{\frac{1}{2}N(N-1)}{N(N-1)(k' + \frac{1}{2})} = \frac{1}{2k'+1} \tag{3.29}$$

hat. Wir wollen hier diese Tatsache kombinatorisch erklären. Für kleinere Teilchenzahlen ist die N-gon-Symmetrie nicht oder nur sehr leicht gebrochen. Unsere Betrachtungen beruhen auf sehr einfachen Annahmen und nicht auf numerischen Studien. Die Hauptzutat ist die folgende Beziehung zwischen verschiedenen magischen Zahlen:

$$J(N, (N-1)k') = J(L, (L-1)k') + J(N-L, (N+L-1)k' + L) \tag{3.30}$$

Diese Beziehung kann rekursiv angewandt werden. Sie bedeutet, daß es für die speziellen magischen Zahlen viele verschiedene Möglichkeiten gibt, einen Zustand aus kleineren magischen Zahlen zusammenzusetzen. Trotzdem ist diese Beziehung etwas anderes als die triviale Beziehung

$$J(N,k) = J(L,k) + J(N-L, k+L) \tag{3.31}$$

die nur einen Block in zwei benachbarte teilt.Die Bedeutung der vorigen Beziehung ist die folgende: Wenn der Abstand k teilbar ist durch $N-1$ und groß genug, dann kann die N-gon-Symmetrie ersetzt werden durch eine L-gon-Symmetrie mit einem kleinen Abstand in einer $N-L$-gon-Symmetrie mit einem großen Abstand. Das ist möglich, weil diese Verteilung von Drehimpulsen unter den Teilchen dieselbe magische Zahl ergibt, aber mit zwei getrennten Blöcken, die weit genug auseinander sind, um getrennt antisymmetriesiert werden zu können.

Das allein reicht noch nicht, um den Symmetrieverlust zu erklären. Die Frage ist, welche dieser möglichen Verteilungen die niedrigste Energie hat und wie nahe die Energien der anderen Verteilungen dieser Minimalenergie kommen. Um diese Frage zu beantworten, braucht man Formel (3.10), um die Energien von verschiedenen Konfigurationen vergleichen zu können. Wenn das System klassisch wäre, bräuchten wir nur $E(N, J/N)$ mit $E(N-1, J/(N-1))$ zu vergleichen. Die erstere Energie ist kleiner als die letztere, solange $N < 6$ ist. Da ein Quantenpunkt quantenmechanisch ist, tragen alle möglichen Konfigurationen bei, und wir müssen die volle Zustandssumme berechnen.

Die obige Formel ist rekursiv. Darüber hinaus ist eine der magischen Zahlen auf der rechten Seite wieder eine spezielle magische Zahl. Es scheint also, daß der "flüssige" Zustand daher rührt, daß für große N viele verschiedene Antisymmetriesierungen bei diesen Zahlen möglich sind, die alle vergleichbare Energien haben, wobei die Energie der $N-1$-gon-Konfiguration die minimale ist für $N \geq 6$. Es gibt sogar Antisymmetriesierungen mit drei oder mehr verschachtelten Blöcken, wenn N groß genug ist.

Wir können den Symmetrieverlust an der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung sehen. An einer magischen Zahl J erwarten wir, daß sie für $N \leq 5$ eine Zacke an $R = \sqrt{J}$ hat und für $N \geq 6$ zwei gleichhohe Zacken, eine bei $R = 0$. Im Folgenden sehen wir aber etwas anderes. In der Abbildung 3.3 vergleichen wir die radialen Wahrscheinlichkeitsverteilungen für einen Bereich $39 \leq J \leq 51$, um die spezielle magische Zahl $J = 45$ für $N = 6$. Man sieht deutlich, daß bei den gewöhnliche magischen Zahlen $J = 39$ und $J = 51$ die volle Z_6-Symmetrie erhalten ist, da dort keine Zacke bei $R = 0$ vorhanden ist. Dagegen ist die Z_5-Symmetrie mit einem Teilchen in der Mitte am ausgeprägtesten für die benachbarten Zahlen $J = 40$ beziehungsweise $J = 50$. Diese sehr empfindliche Abhängigkeit von dem Wert von J ist ein rein quantenmechanischer Effekt, der klassischen Erwartungen widerspricht. Das Verhalten bei der speziellen magischen Zahl $J = 45$ ist jedoch nochmal anders. Es gibt eine gewisse Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen in der Mitte sitzt, aber sie ist nur halb so groß wie die Wahrscheinlichkeit an der Hauptzacke, d.h. daß die Hauptzacke nicht allein von einer Konfiguration kommen kann mit einem Block aus fünf Teilchen und einem Teilchen in der Mitte.

Eine Möglichkeit dieses Resultat zu interpretieren ist zu sagen, daß ein Quantenpunkt sich mehr wie ein quantemechanisches System oder mehr wie ein statistisches Ensemble verhält, je nach dem Wert des Füllfaktors. Das System ist mehr wie ein statistisches Ensemble und ähnelt einem Quantentropfen für

$$\nu = \frac{1}{2k'+1}, \quad k' = 0, 1, 2, \ldots \tag{3.32}$$

was genau dann der Fall ist, wenn J eine spezielle magische Zahl ist. Das System

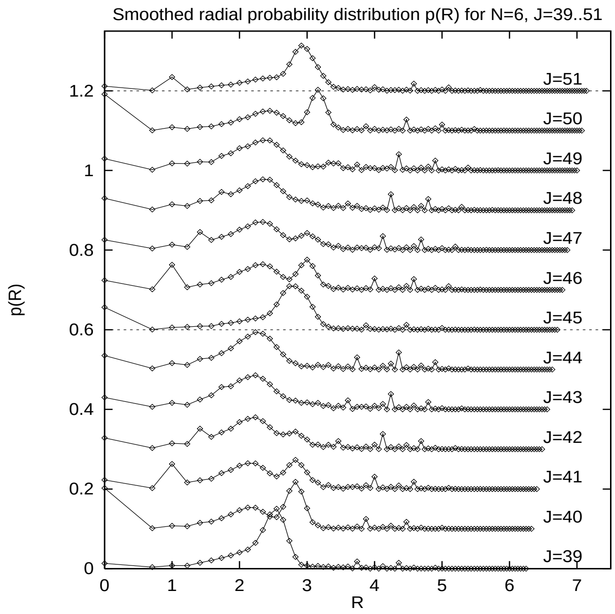


Abbildung 3.3: Radiale Verteilungen für einen Quantenpunkt mit $N = 6$ Elektronen und Gesamtdrehimpuls $39 \leq J \leq 51$. Magisch sind $J = 39, 45, 51$, wobei $J = 45$ eine spezielle magische Zahl ist. Die klassisch erwartete 5-fach-Symmetrie tritt nur bei $J = J_{\text{mag}} \pm 1$ auf. Das System bevorzugt Block-Zustände, was bei den magischen Zahlen am besten funktioniert. Abbildung aus [19].

ist mehr quantenmechanisch und ähnelt einem Atom, wenn J eine gewöhnliche magische Zahl ist.

Am besten vergleicht man das Verhalten bei speziellen magischen Zahlen mit dem von gewöhnlichen magischen Zahlen, indem man die Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion $p(\vec{r}, \vec{r}_0)$ berechnet. Man friert die Position eines Elektrons bei $\vec{r}_0$ ein, und berechnet die Wahrscheinlichkeit, ein anderes an der Position $\vec{r}$ zu finden. Wenn $\vec{r}_0$ so gewählt wird, daß es in einem Orbital mit hoher Wahrscheinlichkeit liegt, dann erhält man Plots, die deutlich die Symmetrieeigenschaften des Quantenpunktzustandes zeigen. Jedoch würden wir hierfür die Wellenfunktion benötigen, die wir nicht berechnen wollen, aber die Information, die in (3.28) enthalten ist, reicht aus, um uns eine semiklassische Näherung der Ladungsdichteverteilung zu geben. Wir wählen einfach die Konfiguration mit der niedrigsten Energie und begeben uns in deren "Ruhesystem". Das bedeutet folgendes: Die Konfiguration mit der minimalen Energie hat eine bestimmte Blockdekomposition und für diese Dekomposition lokalisieren wir die Elektronen an den Ecken der zugehörigen n-gons und "verschmieren" sie mit der Binomialverteilung mit der entsprechenden quantenmechanischen Breite des n-gons. Für $N \leq 5$ ist die minimale Konfiguration ein N-gon, während für $6 \leq N \leq 8$ dies ein $N-1$-gon mit einer besetzten Mitte ist. Für $N \geq 9$ haben wir eine Schalenstruktur wo die relative Orientierung von Elektronen von einer Schale zu denen in einer anderen Schale entsprechend der klassischen Lösung gewählt werden müsste. Alle anderen Konfigurationen werden als drehsymmetrisch betrachtet. Wenn wir auf diese Weise die Näherungen von Ladungsverteilungen übereinanderlegen, erhalten wir ein Maß dafür, wie weit die Konfiguration mit der minimalen Energie aus den anderen herausragt, und somit ein Maß dafür, inwieweit die Symmetrie dieser Konfiguration die Symmetrie der Gesamtkonfiguration bestimmt. Wenn man die Ladungsverteilung auf diese Art und Weise berechnet, muß man die integrierte radiale Wahrscheinlichkeit für einen Block innerhalb einer Konfiguration nicht nur mit der Binomialverteilung gewichten, sondern auch mit einem Faktor $1/2\pi r$, wobei der Radius r über die Breite des Blocks variiert. Solch eine Ladungsverteilung ist zeitgemittelt. In Abbildung 3.4 sehen wir, daß die volle N-gon-Symmetrie sogar für $N \geq 6$ für gewöhnliche magische Zahlen existiert, während Symmetrieverlust auftritt für spezielle magische Zahlen und $N \geq 6$.

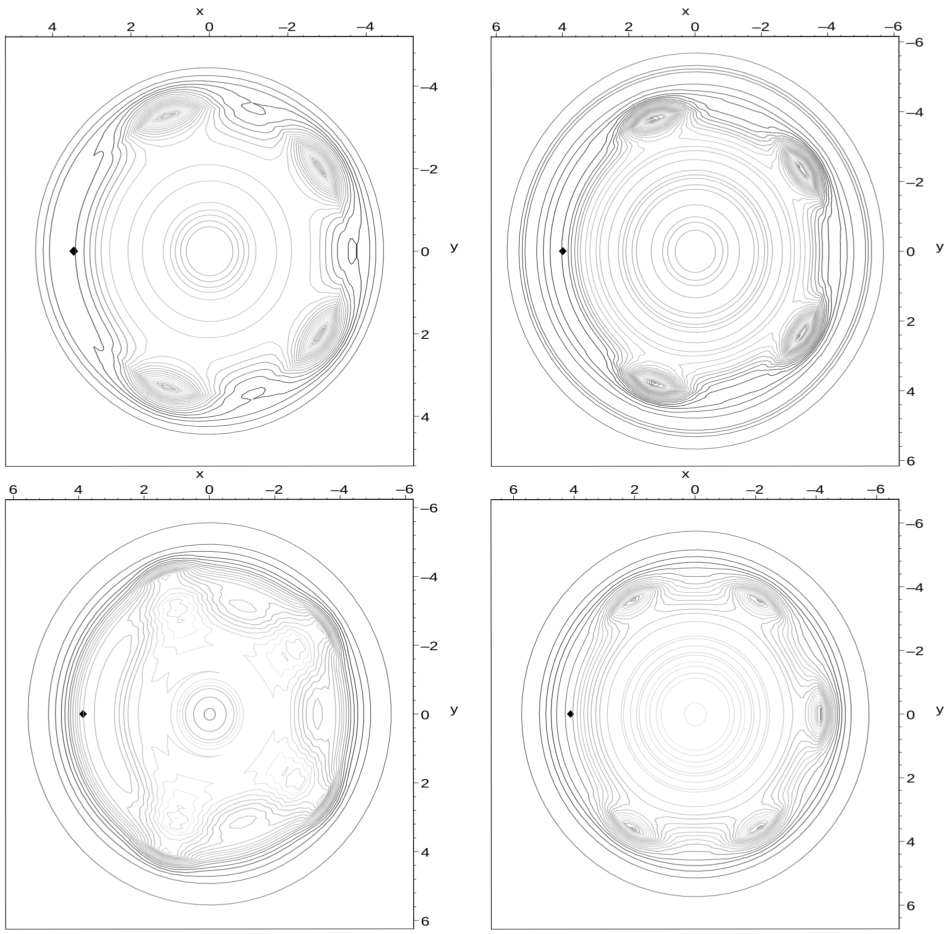


Abbildung 3.4: Ladungsverteilungen für $N = 5$ (oben) und $N = 6$ (unten) im Ruhesystem der Konfiguration mit minimaler Energie. Links sind spezielle magische Zahlen die $\nu = 1/3$ entsprechen, rechts sind gewöhnliche magische Zahlen. Der Fall $N = 6$ zeigt mehr das Verhalten eines Quantentropfens bei einer speziellen magischen Zahl als $N = 5$. Abbildung aus [19].

Wir sehen den Symmetrieverlust für höhere spezielle magische Zahlen, die den Füllfaktoren $\nu = 1/5$ und $\nu = 1/7$ entsprechen. Andererseits ist die volle Z_6-Symmetrie für die meisten, aber nicht alle gewöhnlichen magischen Zahlen erhalten. Die meisten gewöhnlichen magischen Zahlen enthalten keine Zustände der Form $[(1, \bar{\jmath}_1), (N-1, \bar{\jmath}_2)]$ mit Energien, die vergleichbar sind zu der Konfiguration $[(N, \bar{\jmath} = J/N)]$, die für magische Zahlen immer existiert. Der Grund ist, daß es für die meisten magischen Zahlen keine andere Wahl mit einem kleinen $\bar{\jmath}_1$ gibt, was eine niedrigere Energie, als die Energie der $[(N, \bar{\jmath} = J/N)]$ Konfiguration ergeben würde. Eine der Eigenschaften der speziellen magischen Zahlen ist, daß bei diesen Werten des Gesamtdrehimpulses die Konfiguration $[(1,0), (N-1, J/(N-1))]$ möglich wird. Wenn der Gesamtdrehimpuls J groß genug ist, können Konfigurationen, wie

$[(1,1),(N-1(J-1)/(N-1))]$ Energien haben, die kleiner sind, als die Energie der symmetrischsten Konfiguration. In dem Fall von $N=6$ passiert dies das erste Mal für $J=81$, wo die oben genannte Konfiguration aus einem Block mit fünf Teilchen besteht, und einem Teilchen, das um die Mitte in dem Orbital mit $j=1$ kreist. Diese Konfiguration hat eine etwas kleinere Energie, als die Konfiguration mit einem vollen Block aus sechs Teilchen, obwohl der erstere Zustand eine viel kleinere Wahrscheinlichkeit hat, als der letztere. Das liegt daran, daß für sehr großes J der Unterschied zwischen den Energien der Konfigurationen $[(1,0),(N-1,J/(N-1))]$ und $[(1,1),(N-1(J-1)/(N-1))]$ beliebig klein wird.

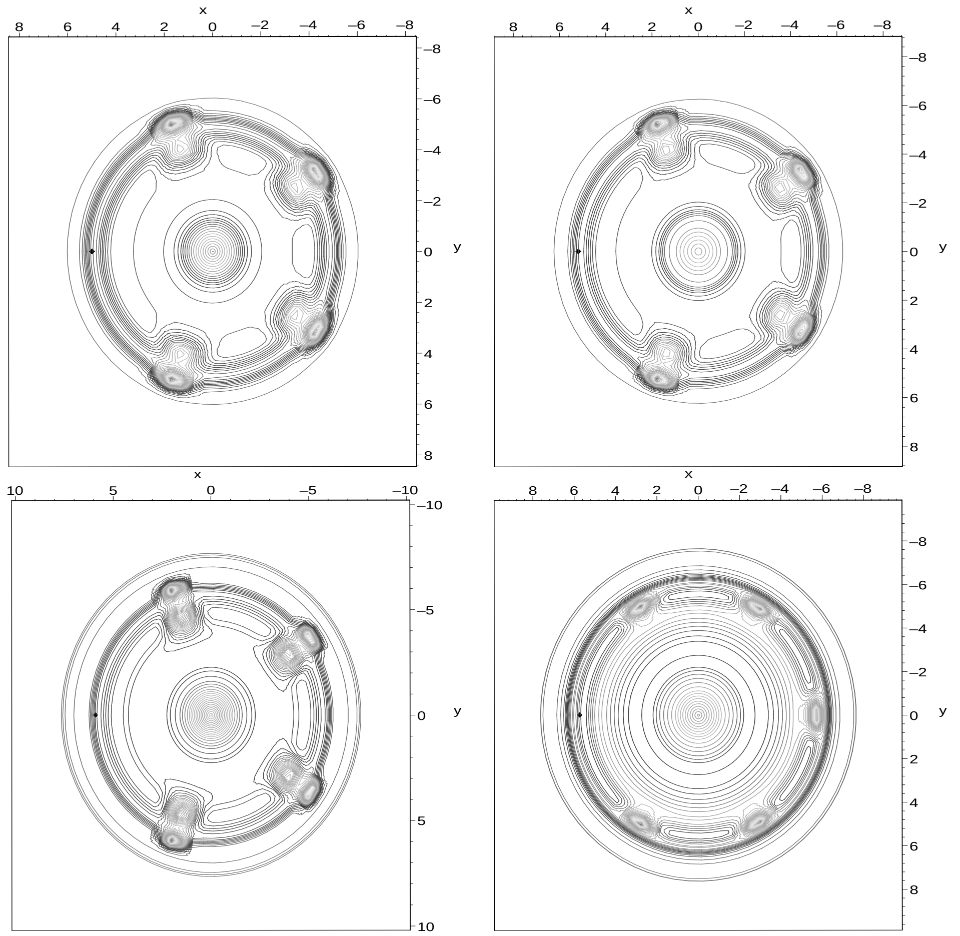


Abbildung 3.5: Vergleich von Füllfaktoren. Links sind Verteilungen für $\nu=1/5$ (oben) und $\nu=1/7$ (unten) mit $J=75$ bzw. $J=105$. Dies wird verglichen mit den gewöhnlichen magischen Zahlen nahe an den speziellen. Es findet keine volle Wiederherstellung der Symmetrie statt für $J=81$ (oben) wo das $j=1$ Orbital besetzt ist, aber wo die Konfiguration mit der niedrigsten Energie kaum höher ist, als die mit der höchsten Symmetrie. Im Fall $J=99$ (unten) ist eine volle Wiederherstellung der Symmetrie zu sehen. Abbildung aus [19].

Für sehr großes J verhält sich das System mehr und mehr klassisch, aber der Übergang vom Quantenmechanischen ins Klassische geschieht nicht kontinuierlich mit größer werdendem J. Z.B. ist die volle Z_6-Symmetrie für die magische Zahl $J=99$ erhalten. Die ersten gewöhnlichen magischen Zahlen, wo die Symmetrie nicht erhalten ist, sind $J(N,k'N)$ für $k'\geq k_0'(N)$ mit z.B. $k_0'(6)=2$ und $k_0'(7)=1$. Diese sind gewöhliche magische Zahlen, die direkt auf spezielle magische Zahlen folgen.

Für höhere J erwarten wir, daß immer mehr magische Zahlen die volle Symmetrie nicht wieder herstellen.

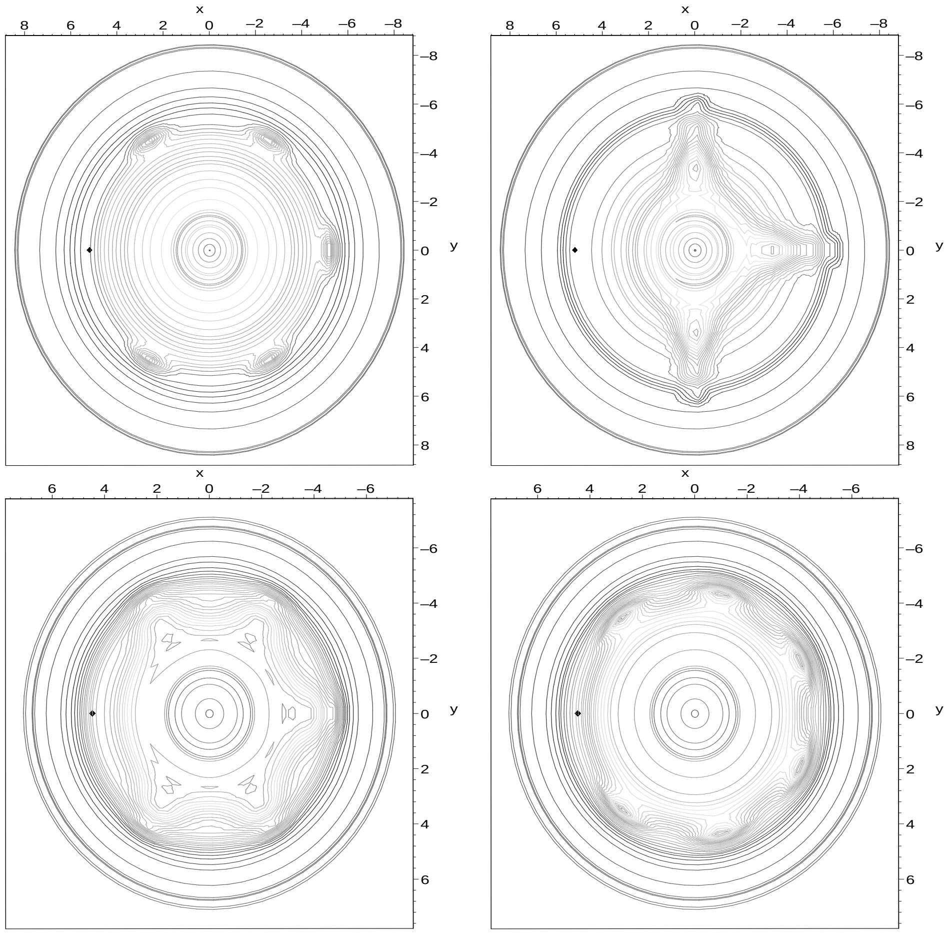


Abbildung 3.6: Vergleich von verschiedenen Ruhesystemen. Die obere Zeile zeigt den Quantenpunkt für $N = 6$ und $J = 81$ in den Ruhesystemen für 6-fache (links) und die 4-fache (rechts) Symmetrie. Der Plot rechts oben in Abbildung 3.5 zeigt das 5-er Ruhesystem. Die Konfiguration mit der vollen Symmetrie dominiert. Die untere Reihe zeigt einen Vergleich für $N = 7$ und $J = 70$ was die erste gewöhnliche magische Zahl nach der speziellen $J = 63$ für $\nu = 1/3$ ist. Der Unterschied zwischen dem Ruhesystem für die höchste Symmetrie (rechts) und dem für die niedrigste Energie (links) ist sehr klein, aber der erstere Fall ist der dominante. Also findet die Wiederherstellung der Symmetrie immer noch statt, aber ist schwächer als bei anderen gewöhnlichen magischen Zahlen. Abbildung aus [19].

Weil die Konfiguration mit der minimalen Energie nicht automatisch die höchste Symmetrie hat, kann sie wegen den unterschiedlichen Multiplizitäten eine kleinere Wahrscheinlichkeit haben. Das ist der Fall, wenn die magischen Zahlen die gewöhnlichen sind. Wenn die magischen Zahlen speziell sind, ist die Konfiguration mit der minimalen Energie die dominierende, wobei die Dominanz nicht sehr stark ist, was genau zu den "flüssigen" Eigenschaften des Quantenpunktzustandes führt. Die Wiederherstellung der Symmetrie sollte auch für die oben genannten gewöhnlichen magischen Zahlen funktionieren. Dies demonstrieren wir in Abbildung 3.6, wo wir Wahrscheinlichkeitsverteilungen vergleichen für verschiedene Ruhesysteme, nämlich das Ruhesystem der Konfiguration mit minimaler Energie und das Ruhesystem der

Konfiguration mit maximaler Symmetrie. Man kann sehen, daß die Wiederherstellung der Symmetrie stattfindet für die gewöhnliche magische Zahl $J(N, k'N)$, aber nicht so stark ausgeprägt, wie für die anderen gewöhnlichen magischen Zahlen.

3.2 Beliebiger Gesamtdrehimpuls

Wir haben im vorigen Abschnitt Zustände von Quantenpunkten angesehen zu fest vorgegebenen Werten der Parameter Teilchenzahl N und Gesamtdrehimpuls J. Während es experimentell möglich ist, die Teilchenzahl in einem Quantenpunkt zu bestimmen, ist es nicht möglich, den Gesamtdrehimpuls vorzugeben oder auch nur zu messen, denn ein reales System befindet sich bei endlichen Temperaturen immer in einer quantenmechanischen Überlagerung von Zuständen mit unterschiedlichem Gesamtdrehimpuls. Wenn wir dies in unser Modell einbauen wollen, müssen wir in unserer Zustandssumme den Gesamtdrehimpuls J berücksichtigen

$$Z = \sum_m S_m \exp\left(-\beta E_m + \mu J_m\right) \tag{3.33}$$

Wir kommen nicht darum herum, Konfigurationen mit unterschiedlichem J zu berechnen. Wieder einmal müsste man, wenn man ganz genau ist, alle unendlich vielen J's betrachten, aber die Gesamtenergie wächst linear mit J und deshalb liefern Konfigurationen mit wachsendem J einen exponentiell gegen null konvergierenden Beitrag zum Gesamtzustand. Wir definieren also einen Cutoff J_c für den Gesamtdrehimpuls und berechnen nur Zustände mit $J < J_c$. Dabei wird J_c nur von der (weiterhin festen) Teilchenzahl N abhängen. Ein bequemes Maß hierfür bietet der Füllfaktor

$$\nu = \frac{N(N-1)}{2J} \tag{3.34}$$

Denn damit können wir sagen, daß wir alle Konfigurationen berücksichtigen wollen mit einem Füllfaktor ν größer als einem bestimmten Grenzwert ν_c. Zu diesem Zweck sehen wir uns einmal in Tabelle 3.1 J's an, die bei unterschiedlichen Teilchenzahlen die Füllfaktoren 1, $\frac{1}{3}$ und $\frac{1}{5}$ liefern. Wir haben festgestellt, daß es ausreicht, J_c so

N/ν	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	3	6	10	15	21	28	36	45
1/3	3	9	18	30	45	63	84	108	135
1/5	5	15	30	50	75	105	140	180	225

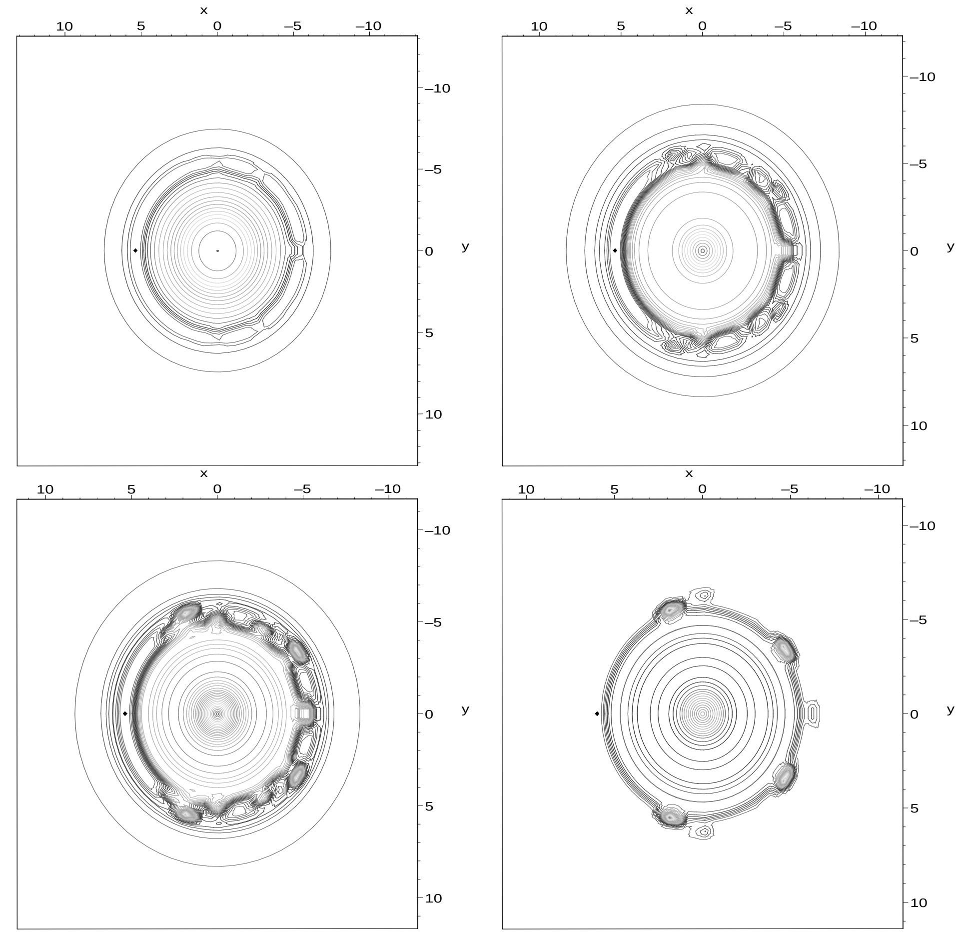
Tabelle 3.1: Der Gesamtdrehimpuls J für verschiedene Werte der Teilchenzahl N und des Füllfaktors ν

zu wählen, daß der Füllfaktor $\nu = \frac{1}{5}$ mit enthalten ist, denn wir haben geprüft, daß die Änderung der radialen Wellenverteilung in Abhängigkeit von J_c für große J_c gegen null geht, d.h. daß wirklich keine Beiträge mehr vorkommen.

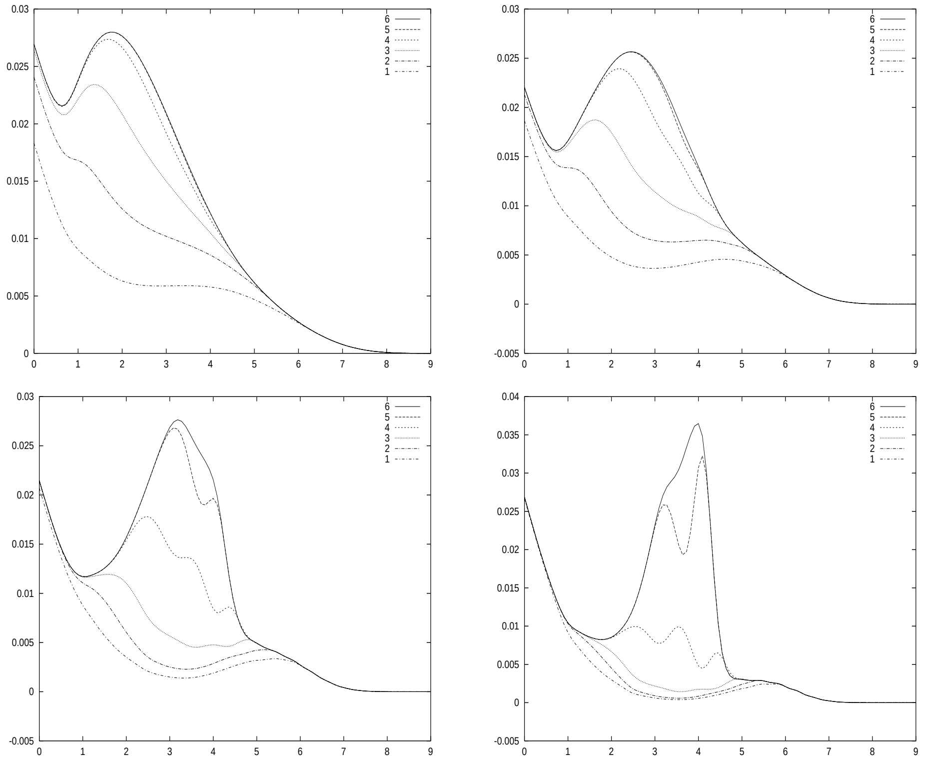
Im Programm müssen wir nun eine Schleife einbauen, die das gleiche macht wie bisher aber nun für jedes J von dem untersten möglichen Wert mit Füllfaktor 1 bis zu J_c. Eine Berechnung auf diese Weise ist möglich, es geht aber noch eleganter. Die Dekomposition in Blöcke ermöglicht eine Klasseneinteilung von Konfigurationen mit gleicher Teilchenanzahl und gleichem Gesamtdrehimpuls bezüglich ihrer Blockanzahl. Was hilft uns das? Wir nehmen ja an, daß Konfigurationen mit weniger Blöcken geringere Energie und höheren Beitrag haben, als welche mit mehreren Blöcken. Deshalb könnten wir eine weitere Näherung einbauen, indem wir Konfigurationen mit vielen kleinen Blöcken nicht berücksichtigen und so Rechenzeit sparen.

“Nicht berücksichtigen” heißt in diesem Fall aber nicht nur, keine Energien zu diesen Konfigurationen zu berechnen, sondern sie gar nicht erst zu erzeugen, denn bei den hohen Zahlen wie in Anhang A.3 aufgelistet ist bereits dies zu aufwendig. Das Problem ist, daß die bisherige Abzählung der Konfigurationen wie in Anhang A.3 dargestellt, ungeordnet bezüglich der Blockanzahl stattfindet. Wir brauchen eine Abzählmethode, die Konfigurationen geordnet nach Blockanzahl beginnend bei 1 erzeugt. Es stellt sich heraus, daß dies ein nichttriviales Problem für den Fall ist, wo N und J fest vorgegeben sind. Der Ausweg besteht darin, J nicht festzuhalten, sondern nur eine Obergrenze anzugeben, bis zu der die neue Abzählmethode Konfigurationen liefern soll. Da wir dies mit unserem Cutoff J_c sowieso tun wollten, ist das kein Problem. Näheres zur dieser Abzählmethode findet sich in Anhang A.3.

Wir können also nun den realen Zustand eines Quantenpunktes simulieren bei einer vorgegebenen Temperatur. Exemplarisch sehen wir hier vier Bilder eines Quantenpunktes mit $N = 6$ Elektronen bei den Temperaturen $\beta = 1$, $\beta = 5$, $\beta = 8$ und $\beta = 10$.



Wir sehen deutlich den Übergang von einem delokalisierten Zustand zu einem lokalisierten Zustand. Um die Phasen genauer identifizieren zu können, benutzen wir die radialen Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Bei hohen Temperaturen sind diese immer ein relativ strukturloses Gebilde ähnlich einer Gaußkurve. Bei sinkender Temperatur sehen wir jedoch die Bildung eines Maximums außerhalb der Mitte. Das liegt daran, daß bei hohen Temperaturen alle Symmetrien etwa gleich häufig vorkommen, während bei niedrigen Temperaturen sich die bevorzugte Symmetrie herausbildet. Ein gutes Maß für Phasengrenzen wären also die jeweiligen Anteile der N 1er-,2er-,... Symmetrien. Wir sehen uns diese an für die obigen Temperaturen.



Die zugehörigen Symmetrie-Anteile sind die Flächen zwischen den Kurven. Man sieht, daß die 5er-Symmetrie die 1er-Symmetrie an einem bestimmten Punkt überholt. Diesen Punkt definieren wir im folgenden als Phasengrenze. Wir möchten nun noch die Anhängigkeit von der kinetischen Energie untersuchen. Diese ist in unserem Fall gegben als der Vorfaktor E in

$$E_{\mathrm{kin}} = E\nu^{-4/3} \tag{3.35}$$

Höhere kinetische Energie bedeutet stärkeres Magnetfeld bzw. steileres einschließendes parabolisches Potential. Dies sollte einen Effekt auf die Phasenübergänge haben.

Dargestellt in Abbildung 3.7 ist der Abstand des Maximums der dominierenden Symmetrie zur 1er-Symmetrie über der E-β Ebene für $N = 4, 5, 6, 7$ Elektronen. Man sieht, daß bei flacherem Potential die Kristallisation bei niedrigeren Temperaturen einsetzt.

3.3 Zusammenfassung und Ausblick

Das kombinatorische Modell liefert sehr gute Näherungen von Zuständen von Quantenpunkten mit wenigen Elektronen. Der Bereich von N und J, den wir mit diesem Programm simulieren können ist größer als der von Methoden mit exakter Diagonalisierung. Das kombinatorische Modell ist eine Mischung aus Quantenmechanik und klassischer Physik. Die Wechselwirkung der Elektronen wird klassisch berechnet. Quantenmechanik kommt ins Spiel durch die Quantisierung des Drehimpulses.

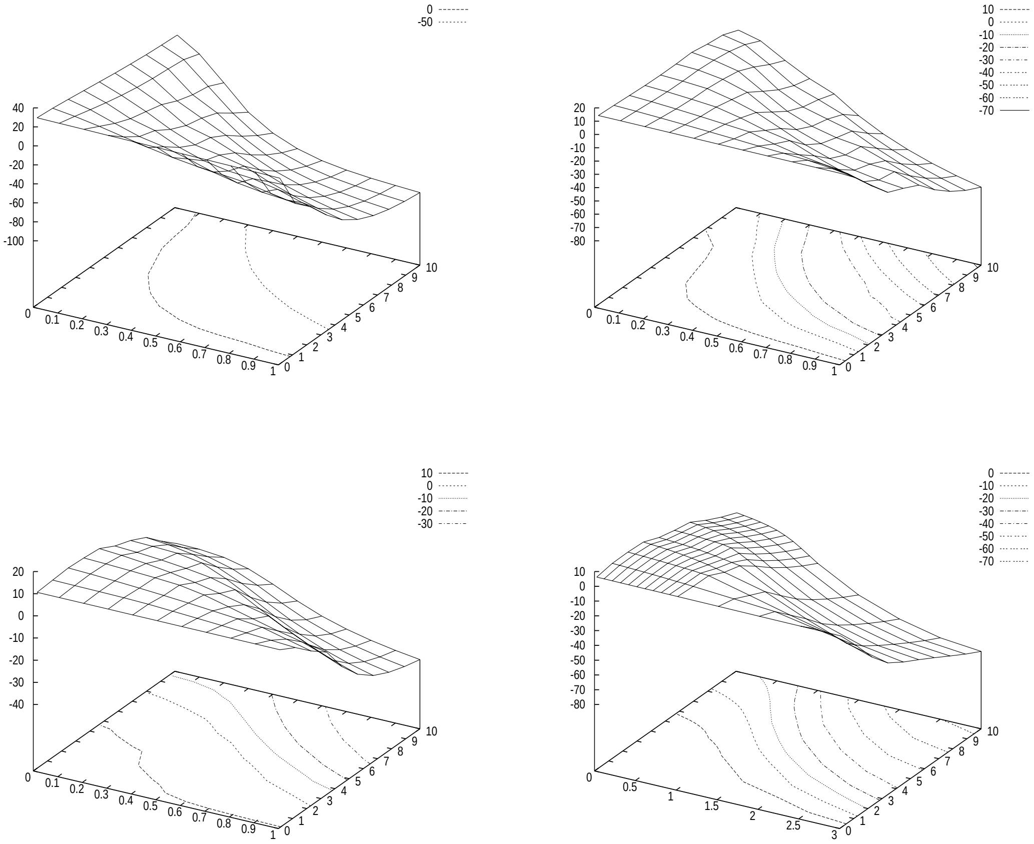


Abbildung 3.7: E-β-Plot für $N = 4$ (links oben), $N = 5$ (rechts oben), $N = 6$ (links unten) und $N = 7$ (rechts unten) Teilchen.

Wir berechnen nur die Zustandssumme und lassen Phaseninformation weg, da in der Zustandssumme nur die Betragsquadrate (die Wahrscheinlichkeiten) von Linearfaktoren vorkommen. Trotzdem reicht die Information, die in der Zustandssumme steckt, aus, um eine Reihe interessanter Größen untersuchen zu können.

Bei der Berechnung der Energien von Konfigurationen machen wir die einfache Annahme, daß die Elektronen sich äquidistant auf einem Kreis anordnen. Dies ist nicht die volle Wahrheit wie man in Abschnitt 2.1 und Abbildung 2.2 sieht. In Anwesenheit eines anderen Blocks verteilen sich die Elektronen eben nicht äquidistant und dadurch entsteht eine höhere Selbstenergie des Blocks. Wir nehmen an, daß dies keinen Einfluß auf das qualitative Ergebnis hat.

Die Entscheidung, welche Faktoren man nimmt, um daraus den Symmetriefaktor einer Konfiguration zusammenzustellen, ist nicht leicht. Die Frage ist, in wie weit sich unterschiedliche Symmetriefaktoren auf das Endergebnis auswirken. Deshalb wurden im Programm mehrere Möglichkeiten eingebaut, sodaß man herumexperimentieren kann. Das Problem bei der Antisymmetrisierung ist, welche Elektronen man antisymmetrisieren soll und welche nicht. Sicher soll man gebundene Elektronen in einem Block nicht mit gebundenen Elektronen in einem anderen Block antisymmetrisieren, solange man die Blöcke als unabhängig betrachtet. Die Frage ist, wie lange man diese Unabhängigkeit annehmen kann. Bei hohen Temperaturen ist es durchaus vorstellbar, daß Elektronen zwischen benachbarten Blöcken hin- und herwechseln. Es ist auch die Frage, ob man innerhalb eines Blocks alle Elektronen antisymmetrisieren soll, weil verschiedene Austauschszenarien verschiedene physikalische Wichtigkeit haben. Man müsste also eventuell die Symmetriefaktorenberechnung an Parameter wie die Temperatur anpassen, oder Energien von Austauschszenarien berechnen, was beides in dem kombinatorischen Modell nicht miteinbezogen wurde.

Es wäre auch interessant, Spin-Effekte einzubauen, die ja auch bei Atomen eine wichtige Rolle spielen. Wenn man zusätzlich die Einschränkung von Spin-Polarisation aufhebt, könnte ein Drehimpulsorbital von zwei Elektronen besetzt werden.

Kapitel 4

Die Laughlin-Wellenfunktion

4.1 Füllfaktor $\nu = 1$

Welche Eigenschaften muß eine Wellenfunktion haben, die zweidimensionale Elektronen mit Koordianten z_i beschreibt? Sie muß

- total antisymmetrisch in allen Koordinaten sein
- normierbar sein, d.h. für große Entfernungen stark genug abfallen

Der erste Punkt impliziert, daß sie für gleiche Koordinaten verschwindet. Außerdem soll sie stetig differenzierbar sein, um keine unendlichen Energien zu liefern. Eine Wellenfunktion, die diese Anforderungen erfüllt, ist die von Laughlin in [40] vorgeschlagene Funktion

$$\psi(z_1, \ldots, z_N) = \prod_{i=1}^{N} \prod_{j=i+1}^{N} (z_j - z_i) \exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right) \tag{4.1}$$

Diese Funktion ist natürlich nur ein Spezialfall aus einer großen Klasse von Funktionen, die ebenfalls die obigen Anforderungen erfüllen [50]. Wenn wir nun so eine Funktion haben, wäre es interessant zu wissen, für welchen Hamiltonian sie eine Lösung ist. Wir probieren es mit dem einfachsten, der uns einfällt, dem wechselwirkungfreien Mehrteilchen-Hamiltonian ohne einschließendes Potential. Wir schreiben ihn hier in komplexen Koordinaten und ohne Vorfaktoren

$$H = \sum_{i=1}^{N} -\partial_i \bar{\partial}_i + \frac{1}{2}(\bar{z}_i \bar{\partial}_i - z_i \partial_i) + \frac{1}{4} z_i \bar{z}_i \tag{4.2}$$

Statt jedoch den Hamiltonoperator auf die Wellenfunktion anzuwenden, erinnern wir uns an die Lösung aus Abschnitt 1.3. Dort hatten wir Slaterdeterminanten erhalten, und für den Fall wo die Magnetfeldstärke gegen unendlich und die Temperatur gegen Null geht einen Spezialfall, den wir hier nocheinmal anders hinschreiben.

$$\psi(z_1, \ldots, z_N) = \begin{vmatrix} 1 & \ldots & 1 \\ z_1 & \ldots & z_N \\ z_1^2 & \ldots & z_N^2 \\ \vdots & & \vdots \\ z_1^{N-1} & \ldots & z_N^{N-1} \end{vmatrix} \prod_{i=1}^{N} \exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right) \tag{4.3}$$

Die Normierungsfaktoren haben wir dabei weggelassen und die charakteristische Länge $l_0 = 1$ gesetzt. Wie wir uns erinnern, ist der Fall von unendlich großem Magnetfeld gleichbedeutend mit dem Fall von verschwindendem einschließendem Potential. Wir werden nun zeigen, daß

$$\prod_{i=1}^{N} \prod_{j=i+1}^{N} (z_j - z_i) = \begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ z_1 & \dots & z_N \\ z_1^2 & \dots & z_N^2 \\ \vdots & & \vdots \\ z_1^{N-1} & \dots & z_N^{N-1} \end{vmatrix} =: D_N \tag{4.4}$$

denn damit wäre bewiesen, daß die Laughlin-Wellenfunktion Lösung des Mehrteilchen-Hamiltonian ohne Wechselwirkung ist. Die Determinante ist die Vandermonde-Determinante D_N. Wir subtrahieren in der Determinante beginnend bei der letzten Zeile von jeder Zeile die vorhergehende multipliziert mit z_1. Dadurch wird die erste Spalte bis auf das erste Element zu null und es entsteht

$$D_N = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & z_2 - z_1 & \dots & z_N - z_1 \\ 0 & z_2^2 - z_1 z_2 & \dots & z_N^2 - z_1 z_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & z_2^{N-1} - z_1 z_2^{N-2} & \dots & z_N^{N-1} - z_1 z_N^{N-2} \end{vmatrix} \tag{4.5}$$

Die Determinante ändert sich durch diese Umformungen nicht. Nun ziehen wir die erste Spalte von den anderen ab, wodurch auch die erste Zeile bis auf das erste Element zu null wird. Dann kann man aus der i-ten Spalte ($i = 2, 3, \dots, N$) den Faktor $z_i - z_1$ herausziehen. Das ergibt

$$D_N = \prod_{i=2}^{N} (z_i - z_1) \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & z_2 & \dots & z_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & z_2^{N-2} & \dots & z_N^{N-2} \end{vmatrix} \tag{4.6}$$

Nach Entwicklung nach der ersten Zeile steht die Vandermonde-Determinate D_{N-1} da. Diese Prozedur kann man nun wiederholen, bis

$$D_2 = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ z_{N-1} & z_N \end{vmatrix} = z_N - z_{N-1} \tag{4.7}$$

übrig bleibt. Insgesamt ergibt sich das Produkt

$$D_N = \prod_{j=1}^{N-1} \prod_{i=j+1}^{N} (z_i - z_j) \tag{4.8}$$

was zu zeigen war. Die Laughlin-Wellenfunktion 4.1 beschreibt also Elektronen bei undendlich hohem Magnetfeld, wo sie spinpolarisiert sind und nur das niedrigste Landau-Niveau besetzen, und bei Temperatur nahe des absoluten Nullpunkts, wo sie die N untersten Drehimpulsorbitale besetzen. Der Füllfaktor ist

$$\nu = \frac{N(N-1)}{2J} = 1 \tag{4.9}$$

wie in Abschnitt 1.3 beschrieben.

4.2 Kleinere Füllfaktoren und Composite Fermions

Was ist zu tun, damit wir auch Wellenfunktionen erhalten können, die Zustände mit Anregungen, d.h. mit besetzten höheren Drehimpulsorbitalen und kleineren Füllfaktoren, beschreiben? Offensichtlich tauchen in der Wellenfunktion 4.1 keine höheren Potenzen von z_i als N auf, und wie wir wissen enthält die Einzelelektronen-Wellenfunktion ihren Drehimpuls als Potenz von z. Wir potenzieren also den z-Anteil. Dies dürfen wir nur mit ungeraden ganzen Zahlen tun, da sonst der fermionische Charakter der Wellenfunktion zerstört würde (solche Funktionen mit geraden Exponenten beschreiben tatsächlich rotierende Bose-Einstein-Kondensate sehr gut [37]).

$$\psi(z_1,\ldots,z_N)=\prod_{i=1}^{N}\prod_{j=i+1}^{N}(z_i-z_j)^{2p+1}\exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right),\quad p=0,1,2,\ldots \tag{4.10}$$

Natürlich können wir auch das ganze Produkt der z_i-z_j insgesamt potenzieren. In der Darstellung mit der Vandermonde-Matrix V_N ergibt sich dann

$$\psi(z_1,\ldots,z_N)=\det\left(V_N\right)^{2p+1}\prod_{i=1}^{N}\exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right)=\det\left(V_N^{2p+1}\right)\prod_{i=1}^{N}\exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right) \tag{4.11}$$

Welchen Füllfaktor hat diese Wellenfunktion? Um diese Frage zu beantworten, wenden wir den Drehimpulsoperator

$$J=\sum_{i=1}^{N}j_i=\sum_{i=1}^{N}\bar{z}_i\bar{\partial}_i-z_i\partial_i \tag{4.12}$$

auf die Wellenfunktion an. Wir erhalten

$$\begin{aligned}
\bar{\partial}_k\psi &= \prod_{i=1}^{N}\prod_{j=i+1}^{N}(z_i-z_j)^{2p+1}\left(-\frac{1}{4}z_k\right)\exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right)\\
\partial_k\psi &= \prod_{i=1}^{N}\prod_{j=i+1}^{N}(z_i-z_j)^{2p+1}\left(-\frac{1}{4}\bar{z}_k\right)\exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right)+\\
&\quad+(2p+1)\prod_{i=1}^{N}\prod_{j=i+1}^{N}(z_i-z_j)^{2p}\exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right)\times\\
&\quad\times\partial_k\prod_{i=1}^{N}\prod_{j=i+1}^{N}(z_i-z_j)
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Sichtlich heben sich bei der Bildung von $\bar{z}_k\bar{\partial}_k-z_k\partial_k$ die ersten beiden Zeilen gegeneinander weg. Gedanken machen müssen wir uns über die Ableitung der Vandermonde-Determinanten in der letzten Zeile. Wir sehen uns an, was die Ableitung bei einem Term der Determinanten bewirkt. Die Terme der Vandermonde-Determinanten haben die besondere Eigenschaft, daß für die darin enthaltenen z's jeder Index von 1 bis N und jede Potenz von 0 bis $N-1$ genau einmal vorkommen. Diese Tatsache ergibt sich einfach aus dem Berechnungsschema von Determinanten mittels Subdeterminanten. Für einen beliebigen Term ist

$$\partial_k z_1^{m_1}\ldots z_k^{m_k}\ldots z_N^{m_N}=m_k\frac{1}{z_k}z_1^{m_1}\ldots z_k^{m_k}\ldots z_N^{m_N} \tag{4.14}$$

Die Ableitung bewirkt also genau das gleiche wie eine Division durch z_k und eine Multiplikation mit der Potenz von z_k. Nun wird in unserem Mehrteilchen-Hamiltonian über $k = 1, 2, \ldots, N$ summiert, d.h. jede Potenz (einschließlich 0) von jedem z_k wird genau einmal Vorfaktor

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N} \partial_k z_1^{m_1} \ldots z_k^{m_k} \ldots z_N^{m_N} &= (0 + 1 + \cdots + N - 1) \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{z_k} z_1^{m_1} \ldots z_k^{m_k} \ldots z_N^{m_N} \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{z_k} z_1^{m_1} \ldots z_k^{m_k} \ldots z_N^{m_N} \end{aligned} \tag{4.15}$$

Das z_k aus unserem Drehimpulsoperator $\bar{z}_k \bar{\partial}_k - z_k \partial_k$ kürzt nun das $1/z_k$ und die übrig bleibende Vandermonde-Determinante erhöht die Potenz der restlichen Vandermonde-Determinanten wieder von $2p$ auf $2p + 1$. Insgesamt haben wir also berechnet, daß

$$J\psi = \frac{N(N-1)}{2}(2p+1)\psi \tag{4.16}$$

und damit ergibt sich als Füllfaktor der Wellenfunktion (4.10)

$$\nu = \frac{N(N-1)}{2J} = \frac{1}{2p+1} \tag{4.17}$$

Eine Untersuchung dieser Wellenfunktion für $p = 1, 2, \ldots$ verschafft uns also Einblick in die Verhältnisse bei den Füllfaktoren mit ungeradzahligem Nenner, die uns auch schon in Kapitel 3 beschäftigt haben. Im nächsten Abschnitt werden wir die Wellenfunktion näher untersuchen, und mit denen aus Kapitel 3 vergleichen.

Die Wellenfunktion

$$\psi(z_1, \ldots, z_N) = \prod_{i=1}^{N} z_i^m \prod_{j=i+1}^{N} (z_i - z_j)^{2p+1} \exp\left(-\frac{1}{4}|z_i|^2\right), \quad p = 0, 1, 2, \ldots \tag{4.18}$$

liefert für $p = 0$ die magischen Zahlen

$$J\psi = \frac{N(N-1)}{2} + mN, \quad m = 0, 1, 2, \ldots \tag{4.19}$$

Die Zustände bei den magischen Zahlen des Gesamtdrehimpulses sind unempfindlich gegenüber einer kleinen Änderung des Magnetfelds. Dieses Verhalten kann man als Inkompressibilität der Zustände bezeichnen in Analogie zu Flüssigkeiten, wo eine Erhöhung des Drucks in einem bestimmten Bereich keine Änderung der Phase bewirkt. Eine Interpretation dieser inkompressiblen Zustände wurde von Laughlin [41] gegeben und weiterentwickelt von Jain [44, 45] als Analogie zum fraktionierten Quanten-Hall-Effekt. Die magischen Zustände von stark wechselwirkenden Elektronen wurden dort identifiziert mit "kompakten Zuständen" von schwach wechselwirkenden *Composite Fermions*. Die Anwesenheit eines parabolischen einschließenden Potentials führt lediglich zu einer Skalierung des äußeren Magnetfeldes

$$B \rightarrow B\sqrt{1 + 4\omega_0^2/\omega_c^2} = B' \tag{4.20}$$

d.h. zu einer Skalierung der charakteristischen Länge, aber verändert nicht die Form der Einzelelektron-Wellenfunktionen. Also entspricht ein System mit einschließendem Potential im Magnetfeld B einem System ohne einschließendem Potential im effektiven Magnetfeld B'. Und dieses erlaubt die Anwendung des CF-Modells. Die Transformation eines Mehrelektronensystems in ein System aus Composite Fermions geschieht durch ein Anbringen von $2m$ Flußquanten eines Magnetfeldes pro

Elektron. Formal wird dies erreicht, indem man die Elektronenwellenfunktion mit einem sogenannten Jastrow-Faktor multipliziert:

$$\psi_L = P \prod_{j<k} (z_j - z_k)^{2m} \phi_{L'} \tag{4.21}$$

Hierbei ist ϕ_L die Wellenfunktion der nicht-wechselwirkenden Elektronen mit Gesamtdrehimpuls L' und ψ_L ist die CF-Wellenfunktion mit Gesamtdrehimpuls $L = L'+mN(N-1)$. P ist ein Projektionsoperator, der auf das niedrigste Landau-Niveau projiziert. In einer Probe der Fläche A ist die Entartung jedes Landau-Niveaus gegeben durch die Anzahl der Flußquanten

$$N_A = \frac{\Phi_{\text{mag}}}{\Phi_0} \tag{4.22}$$

wobei $\Phi_{\text{mag}} = BA$ der magnetische Fluß durch die Fläche A ist, und $\Phi_0 = h/e$ ein einzelnes Flußquantum. Die Elektronendichte pro Zustand, bestimmt durch das äußere Magnetfeld, ist gegben als der Füllfaktor

$$\nu = \frac{N}{N_A} \tag{4.23}$$

Man kann nun zeigen, daß ein Füllfaktor $\nu = \frac{1}{2p+1}$ gleichbedeutend damit ist, daß $2p$ Flußquanten an jedes Elektron gebunden sind [43]. Nach Jain besteht ein kompakter Zustand nicht-wechselwirkender Elektronen aus den niedrigsten besetzten Drehimpulsorbitalen in den niedrigsten $s+1$ Landau-Niveaus. Der kompakte Zustand ist definiert durch ein System von Zahlen

$$[N_0, N_1, \ldots, N_s], \quad \sum N_s = N \tag{4.24}$$

Die Elektronen besetzen die N_s niedrigsten Orbitale im s-ten Landau-Niveau. Der CF-Zustand, resultierend aus dem Anbringen von Flußquanten, wird geschrieben als $[N_0, N_1, \ldots, N_s]_{\text{CF}}$. Die Laughlin-Zustände $[N]_{\text{CF}}$ gehören ebenfalls in diese Klasse. Mit exakter numerischer Diagonalisierung wurde nun gezeigt, daß die Eigenzustände *wechselwirkender* Elektronen sehr nahe an den *nicht-wechselwirkenden* CF-Zuständen sind. So ist z.B. für $N = 6$ der Überlapp für Grundzustände bei $L = 35, 39, 45$ mit den entsprechenden CF-Zuständen 0.991 für $[4,2]_{\text{CF}}$, 0.994 für $[5,1]_{\text{CF}}$ und 0.986 für $[6,0]_{\text{CF}}$. Das heißt, daß die Wechselwirkung zwischen den Elektronen der Grund ist für die Bildung von Composite Fermions. Das System aus Composite Fermions ist ein freies, nicht-wechselwirkendes Mehrteilchen-System. Es ist aber sehr unterschiedlich zum System aus antisymmetrisierten nicht-wechselwirkenden Elektronen, d.h. Slater-Determinanten.

4.3 Vergleich mit den anderen Ansätzen

Die Wellenfunktion (4.10) erlaubt keine einfache Zerlegung in Einteilchen-Wellenfunktionen wie in Abschnitt 4.1 mehr. Sie ist keine Lösung des freien Mehrteilchen-Hamiltonians mehr. Trotzdem muß sie sich weiterhin zerlegen lassen in Determinanten der Form

$$\begin{vmatrix} z_1^{m_1} & \ldots & z_N^{m_1} \\ \vdots & & \vdots \\ z_1^{m_N} & \ldots & z_N^{m_N} \end{vmatrix}, \quad 0 \le m_1 < \cdots < m_N \tag{4.25}$$

mit unterschiedlichen Vorfaktoren, also als Linearkombination dieser Determinanten schreiben lassen, denn diese spannen den Raum aller antisymmetrischen Funktionen in den z_i auf.

Für die Vorfaktoren interessieren wir uns ganz besonders, denn deren relative Größe gibt uns einen Hinweis auf bevorzugte Konfigurationen. Wir hoffen zu sehen, daß Konfigurationen mit Blöcken bevorzugt werden, und dies vielleicht sogar in der gleichen Weise wie in unserem kombinatorischen Modell aus Kapiel 3. Dazu haben wir ein kleines MAPLE-Programm geschrieben. Es erzeugt im ersten Schritt alle Zerlegungen eines vorgegebenen, festen J in N unterschiedliche Werte. Dies seien B Stück:

$$L_i = [j_1, j_2, \ldots, j_N], \quad i = 1, 2, \ldots, B \tag{4.26}$$

Für jede J-Zerlegung wird die zugehörige Slater-Determinante samt Normierung erzeugt

$$\chi_i = \chi(L_i) = \frac{1}{\sqrt{\prod_{k=1}^{N} j_k! 2^{j_k}}} \begin{vmatrix} z_1^{j_1} & \ldots & z_N^{j_1} \\ \vdots & & \vdots \\ z_1^{j_N} & \ldots & z_N^{j_N} \end{vmatrix} \tag{4.27}$$

Dann wird mit dem Polynom (4.10) und der Linearkombination aus den Slater-Determinanten die Gleichung

$$\psi - \sum_{i=1}^{B} A_i \chi_i = 0 \tag{4.28}$$

gebildet. Mit MAPLE ordnen wir diesen Ausdruck nach z-Potenzen und lösen der Reihe nach für die Vorfaktoren die Gleichungen

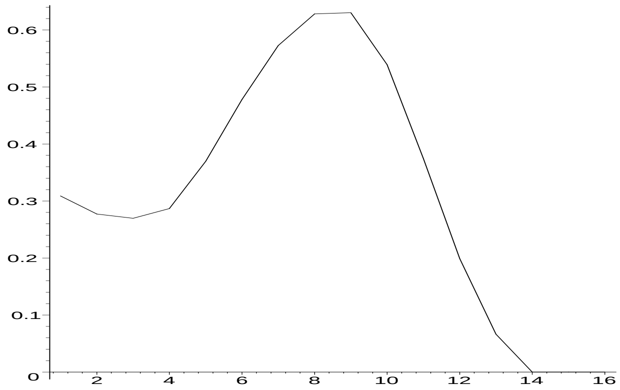
$$(A_i - C_i) = 0 \tag{4.29}$$

Als Ergebnis erhalten wir die Vorfaktoren als A_i, die auch negativ oder null sein können. Als Gewichtung für die Konfiguration χ_i betrachten wir A_i^2. Als Beispiel folgt hier eine sortierte Liste mit Konfigurationen und ihren quadrierten Vorfaktoren für $N = 5$ und $J = 30$.

0.1465	[0,6,7,8, 9]
0.0941	[4,5,6,7, 8]
0.0717	[1,5,7,8, 9]
0.0538	[1,2,8,9,10]
0.0461	[2,5,6,8, 9]
0.0448	[0,5,7,8,10]
0.0418	[3,5,6,7, 9]
0.0350	[2,3,6,9,10]
0.0345	[3,4,6,7,10]
0.0290	[1,3,7,9,10]
0.0290	[1,4,7,8,10]
0.0290	[0,4,7,9,10]
0.0281	[3,4,5,7,11]
0.0262	[2,4,6,8,10]
0.0253	[0,5,6,8,11]

Generell haben wir bemerkt, daß die Wellenfunktion ähnliche Eigenschaften aufweist, wie die in Kapitel 3 erhaltenen. Dort wie hier werden Block-Konfigurationen bevorzugt. In der Laughlin-Wellenfunktion werden jedoch zusätzlich Konfigurationen bevorzugt, die ein regelmäßiges Orbital-Besetzungsmuster zeigen (siehe vorletzte Zeile im Beispiel).

Aus den gewichteten Konfigurationen lassen sich Plots der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung erstellen. Diese haben erwartungsgemäß große Ähnlichkeit mit



denen aus Kapitel 3. Wir haben hier wie dort keine Phaseneffekte berücksichtigt, und diese tauchen in einer radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung auch nicht auf.

Um die Phaseneffekte zu berücksichtigen, sehen wir uns die Korrelationsfunktion $p(z_1, z_2)$ der Laughlin-Wellenfunktion an, wobei wir z_1 festhalten und z_2 graphisch darstellen. Man beachte, daß die Korrelationsfunktion ein Polynom in z_1 und z_2 ist. Um dieses zu gewinnen, gehen wir aus von der Integralform der Korrelationsfunktion

$$p(z_1, z_2) = \int dz_3 \dots dz_N \; |\Psi(z_1, \dots, z_N)|^2 \tag{4.30}$$

wobei Ψ die Linearkombination aus den Slater-Determinanten, die wir oben ausgerechnet haben.

$$\Psi(z_1, \dots, z_N) = \sum_{i=1}^{B} C_i \chi_i(z_1, \dots, z_N) \tag{4.31}$$

Die Einteilchen-Wellenfunktionen

$$\psi_j = z^j \exp(-\frac{1}{2}|z|^2) \tag{4.32}$$

aus denen die Slater-Determinanten gebildet sind, sind orthogonal

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \tag{4.33}$$

Nun betrachten wir einen Term des Betragsquadrates. Er hat ohne den Exponentialanteil die Form

$$\overline{C_{\{\alpha\}} \prod_i z_i^{\alpha_i}} \; C_{\{\beta\}} \prod_j z_j^{\beta_j} \tag{4.34}$$

Bei der Integration bleiben nur solche Terme übrig, in denen die Exponenten der $\overline{z_i}$ genau gleich denen der z_i sind ($i = 3, \dots, N$), die anderen verschwinden wegen der Orthonormalität. Unter diesen Termen gibt es im allgemeinen wiederum mehrere mit gleichen Potenzen in z_1 und z_2. Diese klammern wir aus und können so schreiben

$$\begin{aligned} p(z_1, z_2) &= \int dz_3 \dots dz_N \; C_{\{\alpha\}} C_{\{\beta\}} \overline{z_1}^{\alpha_1} \overline{z_2}^{\alpha_2} z_1^{\beta_1} z_2^{\beta_1} \left(\prod_{3 \le ij \le N} \overline{z_i}^{\alpha_i} z_j^{\beta_j} \right) \\ &= \sum_{i=1}^{B} C_i \overline{z_1}^{\alpha_1} \overline{z_2}^{\alpha_2} z_1^{\beta_1} z_2^{\beta_1} \end{aligned} \tag{4.35}$$

mit einem neuen Vorfaktor C_i, der sich aus Normierungsfaktoren und Gewichtungen von Konfigurationen $C_{\{\alpha\}}$ zusammensetzt. B ist hierbei die Anzahl der unterschiedlichen Konfiguration in z_1 und z_2. Als Beispiel zeigen wir hier das Polynom zu $N = 3$ und $\nu = 1/3$.

$$\begin{aligned} pp\_nu3\_N3 := (46080 \left|-{z_1}^3 + 3\,z_2\,{z_1}^2 - 3\,z_1\,{z_2}^2 + {z_2}^3\right|^2 \\ + 3840 \left|-3\,{z_1}^4 + 6\,{z_1}^3\,z_2 - 6\,z_1\,{z_2}^3 + 3\,{z_2}^4\right|^2 \\ + 384 \left|-3\,{z_1}^5 + 15\,{z_1}^3\,{z_2}^2 - 15\,{z_2}^3\,{z_1}^2 + 3\,{z_2}^5\right|^2 \\ + 48 \left|-{z_1}^6 - 6\,{z_1}^5\,z_2 + 15\,{z_1}^4\,{z_2}^2 - 15\,{z_2}^4\,{z_1}^2 + 6\,z_1\,{z_2}^5 + {z_2}^6\right|^2 \\ + 8 \left|-3\,{z_1}^6\,z_2 + 15\,{z_2}^3\,{z_1}^4 - 15\,{z_1}^3\,{z_2}^4 + 3\,z_1\,{z_2}^6\right|^2 \\ + 2 \left|-3\,{z_1}^6\,{z_2}^2 + 6\,{z_1}^5\,{z_2}^3 - 6\,{z_1}^3\,{z_2}^5 + 3\,{z_2}^6\,{z_1}^2\right|^2 \\ + \left|-{z_1}^6\,{z_2}^3 + 3\,{z_1}^5\,{z_2}^4 - 3\,{z_1}^4\,{z_2}^5 + {z_1}^3\,{z_2}^6\right|^2) e^{(-1/2\,|z_1|^2)}\, e^{(-1/2\,|z_2|^2)} \end{aligned} \tag{4.36}$$

Polynome für mehr Teilchen und kleinere Füllfaktoren werden schnell unhandlicher. Für die graphische Darstellung wählen wir ein reelles $z_1 = r_0$ so, daß

$$r_0 = \sqrt{2\overline{J}}\,, \quad \overline{J} = \frac{J}{N} = \frac{3N(N-1)}{N2} = \frac{3(N-1)}{2} \tag{4.37}$$

sich also ein mittleres j ergibt.

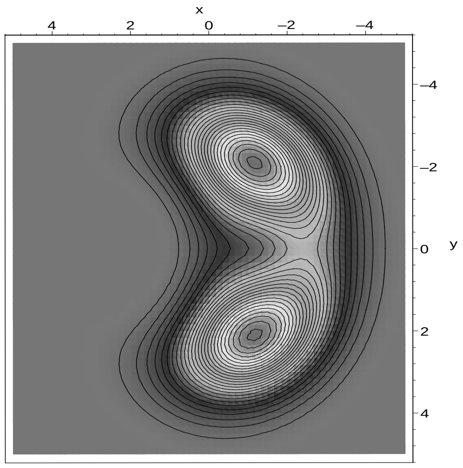


Abbildung 4.1: Paarkorrelation für $N = 3$ und $\nu = 1/3$

An den Bildern sieht man erneut, daß die Laughlin-Wellenfuktion viel "flüssigere" Zustände liefert, als dies bei entsprechenden Quantenpunktzuständen der Fall wäre. Eine interessante Eigenschaft, die wir nicht vorhergesehen haben, ist, daß die Höhen von Peaks zu r_0 hin zunehmen. Man kann dies so interpretieren, daß die Teilchen, die die Laughlin-Wellenfunktion beschreibt eine adhäsive Wirkung haben, also die Neigung zu "klumpen". Abschließend läßt sich sagen: Die Wellenfunktionen vom Laughlin-Typ – so gut sie für den fraktionierten Quanten-Hall-Effekt sind – sind zum Thema Quantenpunkte nicht das letzte Wort.

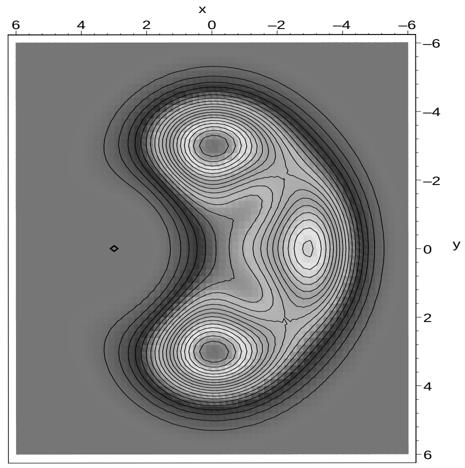


Abbildung 4.2: Paarkorrelation für $N = 4$ und $\nu = 1/3$

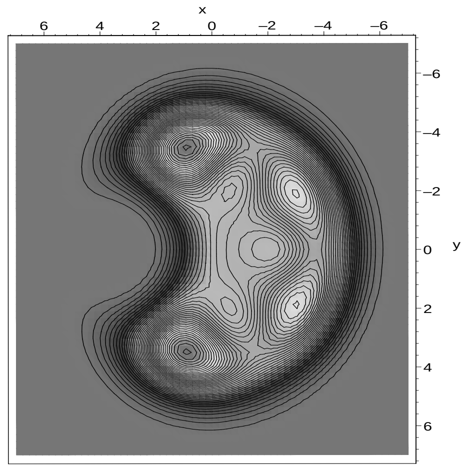


Abbildung 4.3: Paarkorrelation für $N = 5$ und $\nu = 1/3$

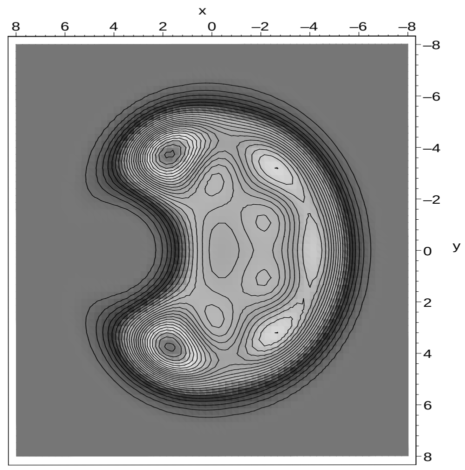


Abbildung 4.4: Paarkorrelation für $N = 6$ und $\nu = 1/3$

Anhang A

Anhang

A.1 Die z's und ∂'s in Polarkoordinaten

Hier ist die gleiche Rechnung wie in Abschnitt 1.2 in – dem rotationssymmetrischen Problem angemessenen – Polarkoordinaten.

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2 \tag{A.1}$$

Wir wählen natürlich die Kreuzeichung

$$\vec{B} = B\vec{e}_z, \quad \vec{B} = \operatorname{rot}\vec{A}, \quad \vec{A} = \frac{1}{2}Br\vec{e}_\varphi \tag{A.2}$$

Außerdem haben wir

$$\vec{r} = r\vec{e}_r, \quad \vec{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla = -\mathrm{i}\hbar\left(\vec{e}_r\partial_r + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r}\partial_\varphi\right) \tag{A.3}$$

Damit ergibt sich, wenn man die Klammer zum Quadrat ausgerechnet hat

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2\right) + \frac{1}{2m}2\mathrm{i}\hbar\frac{e}{c}\frac{B}{2}\partial_\varphi + \frac{1}{2m}\frac{e^2}{c^2}\frac{B^2}{4}r^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2 \tag{A.4}$$

Wir können nun setzen

$$z = r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}, \quad \bar{z} = r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}, \tag{A.5}$$

$$\partial = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\left(\partial_r - \mathrm{i}\frac{1}{r}\partial_\varphi\right), \quad \bar{\partial} = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\partial_r + \mathrm{i}\frac{1}{r}\partial_\varphi\right) \tag{A.6}$$

und sehen, daß diese Operatoren alle wichtigen Relationen erfüllen

$$z\bar{z} = r^2, \tag{A.7}$$

$$\partial z = \bar{\partial}\bar{z} = 1, \quad \bar{\partial}z = \partial\bar{z} = 0, \tag{A.8}$$

$$\bar{z}\bar{\partial} - z\partial = \mathrm{i}\partial_\varphi, \tag{A.9}$$

$$\partial\bar{\partial} = \bar{\partial}\partial = \frac{1}{4}\left(\partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2\right) \tag{A.10}$$

Also ist auch mit dieser Darstellung

$$H = -\frac{2\hbar^2}{m}\partial\bar{\partial} + \frac{1}{2}\hbar\omega_c(\bar{z}\bar{\partial} - z\partial) + \frac{1}{2}m\Omega^2 z\bar{z} \tag{A.11}$$

A.2 Der energetisch niedrigste N-gon-Zustand

Als klassische Konfiguration mit der minimalen Energie erwartet man für wenige Elektronen (z.B. weniger als acht) eine, wo entweder alle Elektronen in gleichen Abständen auf einem Kreisring sitzen, oder wo ein Elektron in der Mitte sitzt und die restlichen auf einem Kreisring. Um dies genauer zu quantifizieren, wollen wir die Energie des folgenden Zustands minimieren:

N Elektronen sitzen an den Ecken

$$\vec{r}_i = R\left(\cos\left(\frac{2\pi}{N}i\right), \sin\left(\frac{2\pi}{N}i\right)\right), \quad i = 1, \ldots, N \tag{A.12}$$

eines regelmäßigen N-Gons. Sie stoßen sich ab durch ein Wechselwirkungspotential

$$V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{V}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^v} \tag{A.13}$$

Gleichzeitig wirkt das einschließende Potential

$$C(\vec{r}_i) = Cr_i^c = CR^c \tag{A.14}$$

Der Drehimpulsterm, der proportional zu r^2 ist, wird nicht extra betrachtet, d.h. die Elektronen seien in Ruhe. Die zu minimierende Gesamtenergie ist also gegeben durch

$$E(R) = NCR^c + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{i\neq j=1}^{N}\frac{V}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^v} \tag{A.15}$$

Zur Berechnung der Coulombsumme sehen wir uns Abbildung A.1 an.

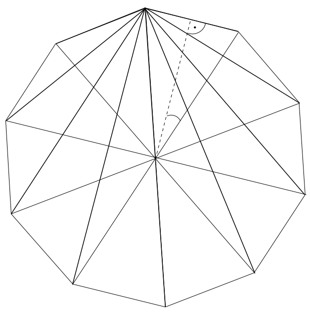


Abbildung A.1: Zur Berechnung der Coulombsumme im N-Gon-Zustand.

Die dort dick eigezeichneten Linien repräsentieren einen Term der äußeren Summe. Um die gesamte Summe zu erhalten, muß man lediglich mit N multiplizieren, da das Problem symmetrisch ist. Die einzelnen Abstände zwischen den Teilchen sind wie aus der Abbildung ersichtlich gegeben durch

$$|\vec{r}_i - \vec{r}_N| = 2R\sin\left(\frac{\pi}{N}i\right), \quad i = 1, \ldots, N-1 \tag{A.16}$$

wodurch sich für die Gesamtenergie ergibt

$$E(R) = NCR^c + \frac{NV}{2(2R)^v}\sum_{i=1}^{N-1}\frac{1}{\sin^v\left(\frac{\pi}{N}i\right)} \tag{A.17}$$

Interessanterweise läßt sich die Summe

$$S(N,v) = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^v\left(\frac{\pi}{N}i\right)} \tag{A.18}$$

für gerade v geschlossen darstellen. Das ergibt sich aus einem Konturintegral über die komplexe Funktion

$$f(z) = \frac{\cot(\pi n z)}{\sin^{2m}(\pi z)}, \quad m = 1, 2, \ldots \tag{A.19}$$

wobei die Kontur so gewählt wird, daß die $n-1$ einfachen Pole bei

$$z_i = \frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \ldots, \frac{n-1}{n} \tag{A.20}$$

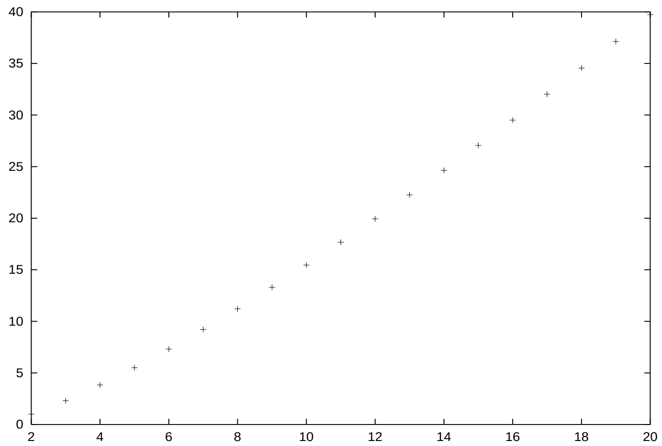
umrundet werden [52]. So ergibt sich z.B. für $v = 2$

$$S(N,2) = \frac{1}{3}(N^2 - 1) \tag{A.21}$$

Für den Fall $v = 1$ habe ich folgende Integraldarstellung gefunden

$$S(N,1) = \frac{N}{\pi} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{N-1} - 1}{(x^N + 1)(x - 1)} \tag{A.22}$$

Eine geschlossene Formel dafür zu gewinnen, ist mir jedoch nicht gelungen. Für die Coulombabstoßung muß man also für verschiedene Teilchenzahlen N die Summe $S(N,1)$ numerisch berechnen. Es ergibt sich eine "monotone" Funktion von der man gar nicht glauben kann, daß sie keine geschlossene Darstellung erlaubt.



Die Gesamtenergie schreiben wir jetzt als

$$E_o(R) = NCR^c + \frac{NV}{2^{v+1}R^v} S(N,v) \tag{A.23}$$

Dies wollen wir nun noch vergleichen mit den Konfigurationen, wo ein Elektron im Mittelpunkt sitzt. Die Gesamtenergie läßt sich in diesem Fall schreiben als

$$\begin{aligned} E_m(R) &= (N-1)CR^c + \frac{(N-1)V}{2(2R)^v} S(N-1,v) + \frac{(N-1)V}{R^v} \\ &= (N-1)CR^c + \frac{(N-1)V}{R^v} \left(\frac{1}{2^{v+1}} S(N-1,v) + 1 \right) \end{aligned} \tag{A.24}$$

Die beiden Fälle unterscheiden sich nur durch die Faktoren der beiden R-Potenzen. Deshalb betrachten wir den allgemeinen Fall

$$E(R) = AR^c + \frac{B}{R^v} \tag{A.25}$$

Um dies zu minimieren leiten wir nach R ab und setzen das Ergebnis gleich 0. Es ergibt sich als minimierender Radius

$$R_0 = \left(\frac{Bv}{Ac}\right)^{\frac{1}{c+v}} \tag{A.26}$$

also für Konfigurationen ohne Teilchen im Mittelpunkt

$$R_{o0} = \left(\frac{VvS(N,v)}{Cc2^{v+1}}\right)^{\frac{1}{c+v}} \tag{A.27}$$

und für Konfigurationen mit einem Teilchen im Mittelpunkt

$$R_{m0} = \left(\frac{Vv}{Cc}\left(\frac{S(N-1,v)}{2^{v+1}}+1\right)\right)^{\frac{1}{c+v}} \tag{A.28}$$

Die minimale Energie ist $E_0 = E(R_0)$. Wir sehen uns als Beispiel den Fall ohne Teilchen im Mittelpunkt und $c = 2$, $v = 2$ an:

$$R_{o0} = \sqrt[4]{\frac{V}{C}\left(\frac{(N^2-1)}{24}+1\right)} \tag{A.29}$$

Man kann Plots für die Funktion

$$\Delta E(N) = E_{o0} - E_{m0} \tag{A.30}$$

für verschiedene Werte von v, c, V und C anfertigen. Man erkennt, daß der Übergang von der Konfiguration ohne Elektron im Mittelpunkt zu der mit Elektron im Mittelpunkt immer zwischen 5 und 6 Teilchen erfolgt. Für mehr als 8 Teilchen kommt es zur Schalenbildung wie in Abschnitt 2.1 erläutert.

A.3 Konfigurations-Kombinatorik

Ein wichtiger Teil des Programms besteht darin, alle Konfigurationen mit einem vorgegebenem Gesamtdrehimpuls J zu erzeugen. Wir wollen hier kurz den benutzten Algorithmus darstellen und Anzahlen von damit berechneten Konfigurationen zeigen, um einen Eindruck von den benötigten Rechenkapazitäten zu erhalten.

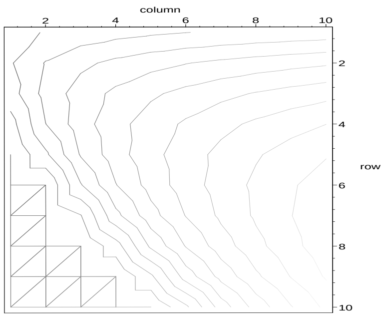
1. Erzeuge die Startkonfiguration indem die $N-1$ untersten Orbitale $j_1, \ldots, j_N - 1$ gefüllt werden und das Nte Teilchen in ein Orbital j_N gesetzt wird, sodaß $\sum_{i=1}^{N} j_i = J$.

2. Verschiebe das $N-1$-te Teilchen einen Platz nach oben und das N-te einen Platz nach unten, wodurch J nicht geändert wird. Wenn dies nicht mehr geht, weil ein Platz besetzt ist, weiter bei 3, sonst weiter bei 2.

3. Setze das $N-2$-te Teilchen einen Platz nach oben und fülle von da ab mit der Methode aus 1 die höheren Orbitale, fahre fort bei 2. Wenn dies nicht geht, weil J zu groß würde, führe 3 mit dem $N-3$-ten, $N-4$-ten, ... Teilchen aus. Wenn auch dies nicht mehr geht, sind alle Konfigurationen abgezählt.

Jede Konfiguration braucht beim Programmablauf einen bestimmten Speicher und eine bestimmte Rechenzeit. In der folgenden Tabelle sind Anzahlen von Konfigurationen aufgelistet für verschiedene Werte der Teilchenzahl N und des Gesamtdrehimpulses J.

N/J	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
2	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
3	8	33	75	133	208	300	408	533	675	833
4	5	47	169	411	816	1425	2280	3422	4894	6736
5	1	30	192	674	1747	3765	7166	12470	20282	31289
6	0	7	110	612	2172	5942	13702	28009	52327	91164
7	0	0	28	300	1579	5731	16475	40340	87816	174696
8	0	0	2	70	638	3319	12450	37638	97539	225132
9	0	0	0	5	123	1076	5708	22380	71362	195666
10	0	0	0	0	7	164	1455	8070	33401	112804
11	0	0	0	0	0	7	169	1586	9373	41373



Die zugehörige Graphik, in der der Logarithmus der Werte aus der Tabelle aufgetragen ist, legt den Verdacht nahe, daß es sich um eine exponentielle Entwicklung handelt. In der Zahlentheorie existieren Näherungsformeln für diese Werte, die wir aber hier nicht wiedergeben wollen.

Wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, wäre es von Vorteil, wenn die Konfigurationen gleich nach ihrer Blockanzahl geordnet erzeugt würden. Gesucht ist also ein Algorithmus, der alle Konfigurationen mit der fest vorgegebenen Blockanzahl l erzeugt, wobei die Teilchenzahl N ebenfalls fest vorgegeben ist und der Gesamtdrehimpuls J kleiner als eine vorgegebene obere Schranke J_c sein soll. Dafür brauchen wir zuerst einen Algorithmus, der alle möglichen Teilchenzahlen pro Block n_i erzeugt, wobei $\sum_{i=1}^{l} n_i = N$. Und dann werden wir einen anderen Algorithmus brauchen, um für jede feste Teilchenzahlverteilung alle möglichen Verschiebungen der $\bar{\jmath}_i$ der Blöcke zu erzeugen.

Die erste Aufgabe löst ein Algorithmus, der alle Möglichkeiten, $l-1$ Kugeln auf $N-1$ Plätze zu verteilen, liefert. Das sind $\binom{N-1}{l-1}$ Möglichkeiten. Dabei wird der Abstand zwischen den Kugeln i und $i+1$ als Teilchenzahl n_i des i-ten Blocks interpretiert. Die Kugel 1 ist dabei der linke Rand und die Kugel l der rechte.

1. Erzeuge die Startkonfiguration indem die ersten $l-1$ Plätze von links gefüllt werden.

2. Verschiebe die $l-1$-te Kugel einen Platz nach rechts solange bis der rechte Rand erreicht ist.

3. Verschiebe die $l-2$-te Kugel einen Platz nach rechts und fülle ab da die nachfolgenden Plätze mit den restlichen Kugeln, weiter bei 2. Wenn dies nicht

geht, versuche 3 mit der $l-3$-ten, $l-4$-ten, ... Kugel. Wenn auch das nicht mehr geht, sind alle Möglichkeiten abgezählt.

Nun zum zweiten Teil. Wir haben jetzt eine feste Verteilung der n_i und müssen damit alle Verteilungen der $\bar{\jmath}_i$ erzeugen, sodaß

$$J = \sum_{i=1}^{l} j_i = \sum_{i=1}^{l} n_i \bar{\jmath}_i < J_c \tag{A.31}$$

Wir gehen hier ähnlich vor wie eben, nur daß wir J bei jeder Verschiebung berechnen müssen, um zu wissen, wann J_c erreicht ist.

1. Erzeuge die Startkonfiguration indem die ersten l Plätze von links gefüllt werden. Berechne das dazugehörige J.

2. Verschiebe den l-ten Block einen Platz nach rechts: $\bar{\jmath}_l$ wird um 1 und J wird um n_l erhöht. Solange, bis $J > J_c$.

3. Verschiebe den $l-1$-ten Block einen Platz nach rechts und fülle ab da die nachfolgenden Plätze mit den restlichen Blöcken, weiter bei 2. Wenn dies nicht geht, weil $J > J_c$ versuche 3 mit dem $l-2$-ten, $l-3$-ten, ... Block. Wenn auch das nicht mehr geht, sind alle Möglichkeiten abgezählt.

Es ist interessant zu sehen, wieviele Konfigurationen man einspart, wenn man für N Teilchen Konfigurationen mit N, $N-1$, $N-2$, ... Blöcken nicht berücksichtigt. In der folgenden Tabelle ist das Verhältnis von der vollen Anzahl der Konfigurationen zu eingesparten Varianten für verschiedene Teilchenzahlen N jeweils für $J = 100$ aufgelistet.

N/M	3	4	5	6	7	8	9
6	34585	284780	955852	1491154	-	-	-
7	28906	259254	1017626	1995178	2390441	-	-
8	22454	205246	854171	1853117	2482666	2608967	-
9	16047	141877	582985	1281826	1776456	1918803	1931266

A.4 Das Potential zweier Blöcke

Im kombinatorischen Modell aus Kapitel 3 wird die potentielle Energie zweier Blöcke "klassisch" berechnet, hieß es. Ein Block bestand dort aus n äquidistant auf einem Kreisring mit Radius r angeordneten Elektronen, sodaß wir also (ohne Selbstenergie der Blöcke) berechnen müssten

$$\begin{aligned} V_{12}(\phi) &= \sum_{i=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2} \frac{e^2}{|\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{2j}|} \\ &= \sum_{i=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2} \frac{e^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\phi_{1i} - \phi_{2j} - \phi)}} \end{aligned} \tag{A.32}$$

Hierbei können wir wählen $\phi_{1i} = 2\pi i/n_1$ und $\phi_{2j} = 2\pi j/n_2$, müssen dann aber noch eine Drehung um ϕ für einen der beiden Blöcke zulassen. Wir sehen also, daß die potentielle Energie $V_{12}(\phi)$ auf diese Weise berechnet, abhängig ist von einem Parameter, den wir in unser Modell nicht einbauen wollen, weil z.B. eine Minimierung in ϕ zu viel Rechenzeit kosten würde. Wir umgehen diese unerwünschte Abhängigkeit indem wir über ϕ mitteln.

$$
\begin{aligned}
V_{12} &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi\ V_{12}(\phi) \\
&= \frac{1}{2\pi}\sum_{i=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2}\int_0^{2\pi} d\phi\ \frac{e^2}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos(\phi_{1i}-\phi_{2j}-\phi)}} \\
&= \frac{1}{2\pi}\sum_{i=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2}\int_0^{2\pi} d\phi\ \frac{e^2}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos(\phi)}} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi\ \frac{n_1n_2e^2}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos(\phi)}}
\end{aligned} \tag{A.33}
$$

Dieses Integral hätten wir auch auf andere Weise erhalten können, nämlich als Potential zweier δ-Ringe. Dazu berechnen wir zuerst den Normierungsfaktor eines δ-Rings mit Ladung ne

$$\int d^3r\ A\delta(r-R) = ne, \quad A = \frac{ne}{2\pi R} \tag{A.34}$$

und damit die potentielle Energie zweier Ringe als

$$V_{12} = \int d^3r_1' \int d^3r_2'\ \frac{n_1e\delta(r_1'-r_1)n_2e\delta(r_2'-r_2)}{4\pi^2 r_1r_2|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \tag{A.35}$$

was, wie man sieht, genau auf (A.33) führt. Dieses Integral ist ein elliptisches Integral erster Ordnung und hat als Lösung die elliptische Funktion erster Ordnung

$$\int_0^{2\pi} dx\ \frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos(x)}} = \frac{4}{r_1+r_2}K\left(\frac{2\sqrt{r_1r_2}}{r_1+r_2}\right) \tag{A.36}$$

Eine einfache numerische Berechnung dieser Funktion ist im Prinzip möglich. Dazu benutzen wir den Zusammenhang mit der Hypergeometrischen Funktion

$$K(k) = \frac{\pi}{2}F\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2};1;k^2\right) \tag{A.37}$$

und deren Reihenentwicklung

$$F(a,b;c;x) = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(a)_r(b)_r}{r!\,(c)_r}x^r, \quad (a)_r = a(a+1)(a+2)\ldots(a+r-1) \tag{A.38}$$

Leider konvergiert die Reihe für k nahe an 1 sehr langsam, und solche Werte kommen in unserem Fall häufig vor. Auch eine Umstellung mit Transformationsformeln für die Hypergeometrische Funktion bringt keine besseren Konvergenzeigenschaften. Es bleibt als einfacher Ausweg nur die numerische Integration mit Stützstellen oder der Gebrauch von vorgefertigten Bibliotheksfunktionen, wobei wir uns hier an der einzigen Stelle im gesamten Programm für letzteres entschieden haben.

Obwohl wir obigen Parameter ϕ im Programm nicht benutzen, ist es interssant, zu untersuchen, welchen Unterschied es gemacht hätte, wenn wir die Energie in ϕ minimiert hätten. Dazu dienen folgende Abbildungen A.2, in denen das Verhältnis von Energien dargestellt ist, die jeweils mit Minimierung und ohne berechnet wurden.

Dabei beobachtet man insbesondere bei ganzzahligen Verhältnissen der Teilchenzahlen der beiden Ringe, daß sich die Energie erheblich reduzieren lässt. Das liegt natürlich daran, daß genau dann *alle* Elektronen auf einem Ring den Abstand zu

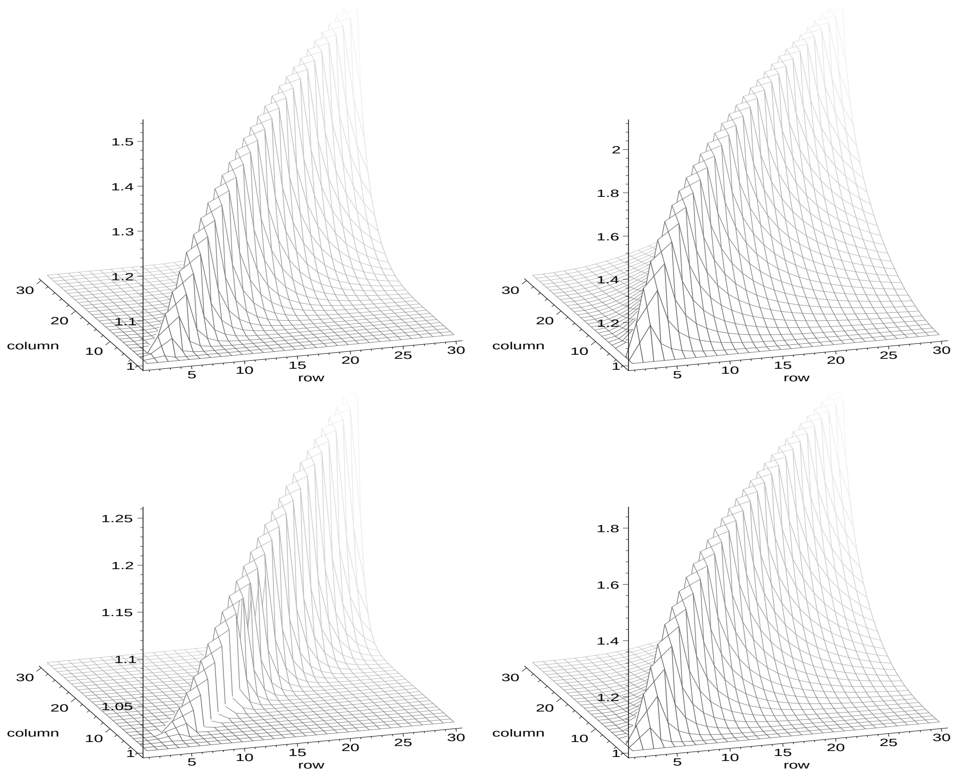


Abbildung A.2: Verhältnisse von nicht-optimierter zu optimierter Energie zwischen zwei Blöcken. Links oben der Fall von 4 und 3 Teilchen. Rechts oben zum Vergleich für 4 Teilchen in beiden Blöcken. Unten links dasselbe für 6 und 5 und unten rechts für 6 und 6 Teilchen.

denen auf dem anderen Ring maximieren können, während es bei nicht-ganzzahligen Verhältnissen innerhalb eines Rings immer Elektronen gibt, die ungünstiger plaziert sind als andere. Dieses Verhalten ist interssant in Bezug auf Wigner-Kristallisation, weil dadurch bei großen Teilchenzahlen soetwas wie ein hexagonale Gitter entsteht. Das aber natürlich erst, wenn die Elektronen sowieso schon klassisches Verhalten zeigen. In unserem Modell müssen wir aber quantenmechanische Effekte berücksichtigen und dazu gehört eine "Verschmierung" der Elektronenzustände, was wir eben dadurch modellieren, daß wir über ϕ mitteln.

Literaturverzeichnis

[1] von Klitzing K, Dorda G, Pepper M
New method for high-accuracy determination of the fine-structure-constant based on quantized Hall resistance
Physical Review Letters 45, 494 (1980)

[2] Tsui DC, Strömer HL, Gossard AC
Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit
Physical Review Letters 48, 1559 (1982)

[3] Sikorski C, Merkt U
Spectroscopy of electronic states in InSb quantum dots
Physical Review Letters 62, 2164 (1989)

[4] Kumar A, Laux SE, Stern F
Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field
Physical Review B 42, 5166 (1990)

[5] Demel T, Heitmann D, Grambow P, Ploog K
Nonlocal dynamic response and level crossings in quantum-dot structures
Physical Review Letters 64, 788 (1990)

[6] Meurer B, Heitmann D, Ploog K
Single-electron charging of quantum-dot atoms
Physical Review Letters 68, 1371 (1992)

[7] Tarucha S, Austing DG, Honda T, van der Hage RJ, Kouwenhoven LP
Shell Filling and Spin Effects in a Few Electron Quantum Dot
Physical Review Letters 77, 3613 (1996)

Quantenpunkte

[8] Geerinckx F, Peeters FM, Devreese JT
Effect of the confining potential on the magneto-optical spectrum of a quantum dot
Journal of Applied Physics 68, 3435 (1990)

[9] Maksym PA, Chakraborty T
Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions
Physical Review Letters 65, 108 (1990)

[10] Maksym PA
Finite-size evidence for Wigner crystallization of 2D electrons in a magnetic field
JPhysCondMat 4, 97 (1991)

[11] Gudmundsson V, Gerhards RR
Self-consistent model of magnetoplasmons in quantum dots with nearly parabo-

lic confinement potentials
Physical Review B 43, 12098 (1991)

[12] Maksym PA, Chakraborty T
Effect of electron-electron interactions on the magnetization of quantum dots
Physical Review B 45, 1947 (1992)

[13] Maksym PA
Magic Number ground states of quantum dots in a magnetic field
Physica B 184, 385 (1993)

[14] Maksym PA
Accurate Molecular Description of a 3-Electron Quantum Dot
Europhysical Letters 31, 405 (1995)

[15] Ruan WY, et al.
Origin of magic angular momenta in few-electron quantum dots
Physical Review B 51, 7942 (1995)

[16] Maksym PA
Eckardt frame theory of interacting electrons in quantum dots
Physical Review B 53, 10871 (1996)

[17] Seki T, Kuramoto Y, Nishino T
Origin of Magic Angular Momentum in a Quantum Dot under Strong Magnetic Field
Journal of the Physical Society of Japan 65, 3945 (1996)

[18] Anisimovas E, Matulis A
Energy Spectra of Few-Electron Quantum Dots
cond-mat/9711079

[19] Flohr M
Fun with Quantum Dots
cond-mat/9811288 (1998)

[20] Jacak L, Hawrylak P, Wojs A
Quantum Dots
Springer 1998

[21] Steffens O, Rössler U, Suhrke M
Generalized Hund's rule in the addition spectrum of a quantum dot
Europhysics Letters 42, 529 (1998)

[22] Chakraborty T
Quantum Dots
North Holland 1999

[23] Bruce NA, Maksym PA
Quantum states of interacting electrons in a real quantum dot
Physical Review B 61, 4718 (1999)

[24] Maksym PA, Immamura H, Mallon GP, Aoki H
Molecular aspects of electron correlation in quantum dots
JPhysCondMat 12, 299 (2000)

[25] Mikhailov SA
Quantum-dot lithium in zero magnetic field: Electronic properties, thermodynamics and Fermi liquid-Wigner solid crossover in the ground state
Physical Review B 65, 115312 (2001)

Wigner-Kristallisation

[26] Wigner E
On the interaction of electrons in metals
Physical Review 46, 1002 (1934)

[27] Bedanov VM, Peeters FM
Ordering and phase transitions of charged particles in a classical finite two-dimensional system
Physical Review B 49, 2667 (1993)

[28] Chamon CC, Wen XG
Sharp and smooth boundaries of quantum Hall liquids
Physical Review B 49, 8227 (1994)

[29] Schweigert VA, Peeters FM
Spectral properties of classical two-dimensional clusters
Physical Review B 51, 7700 (1994)

[30] Müller HM, Koonin SE
Phase transitions in quantum dots
Physical Review B 54, 14532 (1996)

[31] Date G, Murthy MVN, Vathsan R
Classical Many-particle Clusters in Two Dimensions
cond-mat/9802034 (1998)

[32] Yannouleas C, Landman U
Spontaneous Symmetry Breaking in Single and Molecular Quantum Dots
Physical Review Letters 82, 5325 (1998)

[33] Reimann SM, Koskinen M, Manninen M, Mottelson BR
Quantum Dots in Magnetic Fields: Phase Diagram and Broken Symmetry at the Maximum-Density-Droplet Edge
Physical Review Letters 83, 3270 (1998)

[34] Reimann SM, Koskinen M, Manninen M
Formation of Wigner molecules in small quantum dots
Physical Review B 62, 8108 (2000)

[35] Reusch B, Häusler W, Grabert H
Wigner molecules in quantum dots
Physical Review B 63, 113313 (2000)

[36] Filinov AV, Bonitz M, Lozovik YuE
Wigner Crystallization in Mesoscopic 2D Electron Systems
Physical Review Letters 86, 3815 (2001)

[37] Manninen M, Viefers S, Koskinen M, Reimann SM
Many-body spectrum and particle localization in quantum dots and finite rotating Bose condensates
Physical Review B 64, 245322 (2001)

[38] Yang K, Haldane FDM, Rezayi EH
Wigner crystals in the lowest Landau level at low-filling factors
Physical Review B 64, 81301 (2001)

[39] Kong M, Partoens B, Peeters FM
Transitions between ground state and metastable state in classical two-dimensional atoms

Physical Review E 65, 46602 (2002)

Composite Fermions

[40] Laughlin RB
Quantized Hall conductivity in two dimensions
Physical Review B 23, 5632 (1981)

[41] Laughlin RB
Quantized motion of three two-dimensional electrons in a strong magnetic field
Physical Review B 27, 3383 (1983)

[42] Laughlin RB
Anomalous quantum Hall effect: An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations
Physical Review Letters 50, 1395 (1983)

[43] Jain JK
Composite-Fermion Approach for the Fractional Quantum Hall Effect
Physical Review Letters 63, 199 (1989)

[44] Jain JK, Kawamura T
Composite fermions in quantum dots
Europhysical Letters 29, 321 (1995)

[45] Kamilla RK, Jain JK
Composite fermion description of correlated electrons in quantum dots: Low-Zeeman-energy limit
Physical Review B 52, 2798 (1995)

[46] Narevich R, Murthy G, Fertig HA
Hamiltonian theory of the composite-fermion Wigner crystal
Physical Review B 64, 245326 (2001)

Sonstiges

[47] Fock V
Bemerkung zur Quantelung des harmonischen Oszillators im Magnetfeld
Zeitschrift für Physik 47, 446 (1928)

[48] Darwin CG
The diamagnetism of the free electron
Proc. Cambridge Philos. Soc. 27, 86 (1930)

[49] Landau LD, Lifshits EM
Course of theoretical physics, vol. 3: Quantum mechanics: non-relativistic theory
Pergamon Press, Oxford, New York (1977)

[50] Flohr M, Varnhagen R
Infinite Symmetry in the Fractional Quantum Hall Effect
hep-th/9309083 (1993)

[51] Pöppe C
Rechnen mit garantierter Genauigkeit
Spektrum der Wissenschaft 9/2000, S. 54

[52] Harvey JA, Kutasov D, Martinec EJ, Moore G
Localized Tachyons and RG Flows
hep-th/0111154 (2001)

Danksagung

Ich danke Herrn Professor Lechtenfeld für die Vergabe der Diplomarbeit und Herrn Professor Schulz für die Übernahme des Amtes des Co-Referenten.

Michael Flohr danke ich für das spannende Thema und die sehr gute Betreuung und Zusammenarbeit.

Meine Mutter hat mich während meiner gesamten Studienzeit (und auch Nicht-Studienzeit, also praktisch immer) finanziell unterstützt. Dafür danke ich ihr vorerst einmal, und hoffe für die Zukunft, daß es eine gute Investition war.

Bei meiner Freundin möchte ich mich bedanken dafür, daß sie besonders in der Endphase der Diplomarbeit alles profanere von mir ferngehalten hat.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich diese Diplomarbeit selbständig und ohne Verwendung von anderen als den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Hannover, den 30. September 2002

Stephan Rafler