

耦合量子细胞的非线性特性*

王传奎¹⁾ 高铁军¹⁾ 薛成山²⁾

¹⁾ 山东大学物理系, 济南 250014)

²⁾ 山东大学半导体所, 济南 250014)

(2000 年 3 月 26 日收到)

研究了两种不同排列的耦合量子细胞的非线性特性. 方形量子细胞由位于角上的四个量子点组成, 设每个量子细胞内包含两个电子, 则不同的量子细胞将通过库仑作用发生耦合. 单个细胞内的电子易于占据位于对角线上的量子点, 从而导致了细胞的极化. 当一个细胞的极化率发生改变时, 在稳定态的情况下, 计算了另一个细胞的极化率. 研究结果表明, 在适当的参数下, 第二个细胞的极化率的响应显示出良好的非线性特性.

关键词: 极化响应, 量子细胞, 量子点

PACC: 7335, 7340G

1 引 言

随着半导体纳米技术的发展, 科学家们已可制备出尺寸在几十个纳米范围内的量子点^[1]. 该类量子点包含着有限数量的电子, 被认为是研究少体体系性质的很好对象^[2,3]. 由于量子点的电荷和能量都是量子化, 故它具有原子的特性, 从而被称为人造原子. 最近, 实验和理论研究人员在研究耦合量子点的性质方面开展了许多工作^[4-8], 认为耦合量子点可作为未来电子学器件的基元, 并预料该类器件比起目前的固体电子学器件具有相当快的信息传播速度.

利用量子点, Lent 等人提出量子细胞自动制 (Quantum Cellular Automata) 可作为执行运算的新技术^[5]. 这个想法是建立在由五个量子点组成的方形细胞上, 每一个细胞包含两个电子, 其中四个量子点位于该细胞的四个角上, 剩下的一个位于细胞的中心. 由于库仑排斥作用, 电子易于占据位于对角线上的量子点, 这样一来, 单个细胞具有两个等价的极化态. 在稳定态的情况下, Lent 等人的理论结果表明, 对于直线排列的细胞链, 当某一个细胞的极化状态发生改变时, 它将引起其近邻细胞的极化状态以相同的方式改变, 从而该极化状态可沿着细胞链传播开来. 这一特性可用来传播二元信息.

本文选取包含着四个量子点的量子细胞作为研究对象. 如图 1 所示, 每一个量子细胞取方形, 每一个圆圈代表一个量子点. 量子细胞按两种方式排列, 一种为细胞成水平线排列 (图 1(a)), 另一种为细胞成对角线排列 (图 1(b)). 在稳定态的情况下, 我们系统地研究了两个量子细胞的极化率的响应关系.

2 理论模型

现考虑一个孤立的量子细胞. 该细胞由四个量子点组成且包含两个电子, 电子可在细胞内量子点间隧穿. 在稳定态的情况下, 即仅研究细胞处于基态的情况, 此对电子具有相反的自旋. 设细胞由扩展的赫伯德哈密顿量描述.

$$H_0 = \sum_{m, \sigma} E_{0, m} \hat{n}_{m, \sigma} - L \sum_{m, \sigma} (\hat{a}_{m+1, \sigma}^+ \hat{a}_{m, \sigma} + \hat{a}_{m, \sigma}^+ \hat{a}_{m+1, \sigma}) + \sum_m E_Q \hat{n}_{m, \uparrow} \hat{n}_{m, \downarrow} + \sum_{m > j, \sigma, \sigma'} V_Q \frac{\hat{n}_{m, \sigma} \hat{n}_{j, \sigma'}}{|\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j|}. \quad (1)$$

这里 $\hat{a}_{m, \sigma}$ ($\hat{a}_{m, \sigma}^+$) 为消灭 (产生) 算符, $\hat{n}_{m, \sigma}$ 为粒子数算符. 方程 (1) 右边第一项是单点能, $E_{0, m}$ 是量子点 m 的势能, 我们假设 $E_{0, m} = E_0$, 且令 E_0 为能量零点; 第二项描述细胞内最近邻量子点间的电子隧穿, L 是最紧邻量子点间的交叠积分; 第三项是赫伯德能; 最后一项代表细胞内不同量子点间库仑

* 国家自然科学基金 (批准号 69890221) 和山东省优秀中青年科学家奖励基金资助项目.

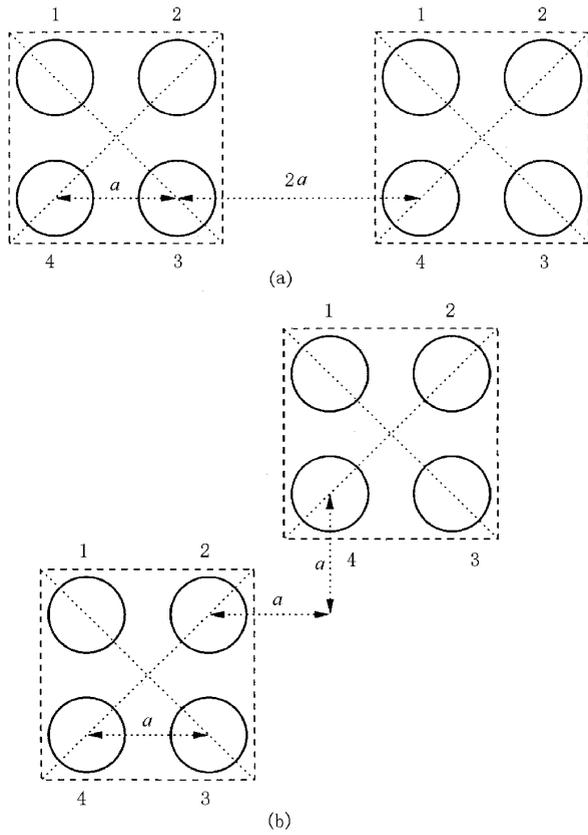


图 1 耦合量子细胞示意图(圆形代表一个量子点)(a)两个量子细胞以直线排列(b)两个量子细胞以对角线排列

相互作用能, $V_Q = e^2 / (4\pi\epsilon_0\epsilon_r)$, \mathbf{R}_m 和 \mathbf{R}_j 分别为量子点 m 和 j 的中心的位置.

当存在两个量子细胞时, 设细胞间的距离较大, 此时细胞间的隧穿概率很小, 可假设为零, 则细胞间的库仑相互作用哈密顿量可表示为

$$H_{\text{int}} = \sum_{i \in \text{细胞1}} V_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}), \quad (2)$$

式中

$$V_i = \sum_{j \in \text{细胞2}} V_Q \frac{\rho_{j2} - \bar{\rho}}{|\mathbf{R}_{j2} - \mathbf{R}_{i1}|}, \quad (3)$$

这里, ρ_{j2} 是细胞 2 第 j 个量子点内的平均电子数, $\bar{\rho} = 0.5$ 是正电荷背景的平均值, 从而保证了细胞的中性, \mathbf{R}_{j2} 和 \mathbf{R}_{i1} 表示细胞 2 第 j 个量子点和细胞 1 第 i 个量子点的位置.

细胞 1 的总哈密顿量为

$$H = H_0 + H_{\text{int}}. \quad (4)$$

需要求解的本征值方程为

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (5)$$

细胞 2 亦有类似的本征值方程.

现在我们选取占有数表象, 其基矢为 $|n_{1\uparrow},$

$n_{1\downarrow}, n_{2\uparrow}, n_{2\downarrow}, n_{3\uparrow}, n_{3\downarrow}, n_{4\uparrow}, n_{4\downarrow}$. 由于仅考虑自旋相反的一对电子, 因此有 16 个正交归一基矢,

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0\rangle, \\ |2\rangle &= |1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0\rangle, \\ |3\rangle &= |1, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0\rangle, \\ |4\rangle &= |1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\rangle, \\ |5\rangle &= |0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0\rangle, \\ |6\rangle &= |0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0\rangle, \\ |7\rangle &= |0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 0\rangle, \\ |8\rangle &= |0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0\rangle, \\ |9\rangle &= |0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0\rangle, \\ |10\rangle &= |0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1\rangle, \\ |11\rangle &= |0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0\rangle, \\ |12\rangle &= |0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0\rangle, \\ |13\rangle &= |0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0\rangle, \\ |14\rangle &= |0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1\rangle, \\ |15\rangle &= |0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0\rangle, \\ |16\rangle &= |0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1\rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

在占有数表象中, 哈密顿量 H 的本征态 $|\psi\rangle$ 可展开为

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{16} c_j |j\rangle. \quad (7)$$

把(7)式代入(5)式可得

$$\sum_{j=1}^{16} c_j [k |H|j\rangle - E\delta_{jk}] = 0, \quad k = 1, 2, \dots, 16. \quad (8)$$

求解该方程可以得到任意一个量子细胞的本征值和本征矢量.

现定义一个量子细胞 j 的极化率为

$$P_j = \frac{\rho_{1j} + \rho_{3j} - \rho_{2j} - \rho_{4j}}{2}, \quad (9)$$

其中 $\rho_{1j}, \rho_{2j}, \rho_{3j}, \rho_{4j}$ 分别为该量子细胞上四个量子点的平均电子数. 当细胞 j 处于 l 态时, 其第 k 个量子点上的平均电子数可表示为

$$\rho_{kj} = \langle \psi_l | (\hat{n}_{k\uparrow} + \hat{n}_{k\downarrow}) | \psi_l \rangle. \quad (10)$$

3 数值结果

利用上节建立的理论模型计算了耦合量子细胞处于基态时的极化率. 图 2 和图 3 分别对应于耦合

细胞以图 1(a) 和 (b) 的方式排列. 在计算过程中, 给出赫伯德能 E_Q 和最紧邻量子点间的交叠积分 L 的比值^[7], 并选左边的量子细胞作为驱动细胞, 给定该驱动细胞的极化率, 从而研究右边量子细胞的极化率的响应. 在计算过程中, 考虑稳态的情况, 即耦合量子细胞处于基态. 由图 2 可见, 当 E_Q/L 增大时, 右边量子细胞的极化率响应越来越显示出非常好的非线性特性. 对于一定范围的 E_Q/L , 两个量子细胞的极化状态保持以相同的方式改变. 由图 3 可见, 当 E_Q/L 增大时, 右边的量子细胞的极化率亦越来越显示出非常好的非线性特性, 此时两个量子细胞的极化状态保持以相反的方式改变, 表现出与图 2 不同的响应特性. 计算结果表明, 由四个量子点组成的量子细胞可以作为实现量子细胞自动制的单元. 这些量子细胞以不同的方式排列形成量子细胞链时, 可以以不同的方式传播驱动细胞的极化状态, 从而可传播二元信息. 需要特别指明的是, 该信息的传播是通过库仑相互作用来实现的, 而不是通

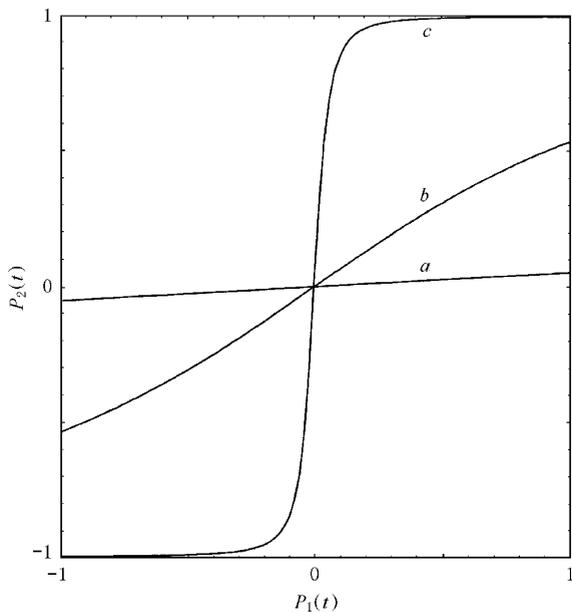


图 2 两个量子细胞的极化率的响应特性(两个量子细胞的排列方式由图 1(a) 给出, $E_Q/L = 4$ (a) 16(b) 80(c))

过电子的流动来实现的, 因此信息的传播可以达到非常高的速度.

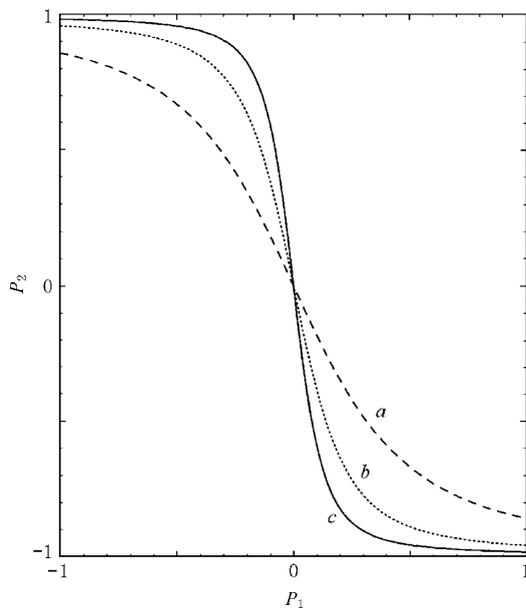


图 3 两个量子细胞的极化率的响应特性(两个量子细胞的排列方式由图 1(b) 给出, $E_Q/L = 20$ (a) 30(b) 40(c))

- [1] U. Meirav, M. A. Kastner, S. J. Wind, *Phys. Rev. Lett.*, **65** (1990), 771.
- [2] L. J. Geerligs, C. J. P. M. Harmans, L. P. Kouwenhoven, *Physica* **B189** (1993).
- [3] T. Ezaki, N. Mori, C. Hamaguchi, *Phys. Rev.*, **B56** (1997), 6428.
- [4] C. A. Stafford, S. das Sarma, *Phys. Rev. Lett.*, **72** (1994), 3590.
- [5] C. S. Lent, P. D. Tougaw, W. Porod, *J. Appl. Phys.*, **74** (1993), 3558; P. D. Tougaw, C. S. Lent, *ibid.*, **75** (1994), 1818.
- [6] I. Amlani, A. O. Orlov, G. L. Snider, G. S. Lent, G. H. Bernstein, *Appl. Phys. Lett.*, **71** (1997), 1730.
- [7] C. K. Wang, I. Yakymenko, I. V. Zozoulenko, K. F. Berggren, *J. Appl. Phys.*, **84** (1998), 2684.
- [8] C. S. Lent, P. D. Tougaw, *Proc. IEEE*, **85** (1997), 541.

NONLINEAR CHARACTERISTIC OF TWO COUPLED QUANTUM-DOT CELLS*

WANG CHUAN-KUI¹⁾ GAO TIE-JUN¹⁾ XUE CHENG-SHAN²⁾

¹⁾*Department of Physics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China*

²⁾*Institute of Semiconductor, Shandong Normal University, Jinan 250014, China*

(Received 26 March 2000)

ABSTRACT

The nonlinear behavior of two kinds of arrays of two coupled quantum-dot cells was examined. Each square cell composed of four quantum dots in the corners contains two electrons and couples with the neighboring cell by Coulomb interaction. The electrons in one cell tend to occupy antipodal dots which results in a cell "polarization". In steady-state regime, we have investigated the evolution of the polarization of one cell under the switch of the polarization of the other cell. Our results demonstrated that the response of the polarization of one cell to that of the other cell exhibits a good nonlinear characteristics with suitable parameters.

Keywords : polarizing response , quantum cells , quantum dots

PACC : 7335 , 7340G

*Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 69890221) and Shandong Distinguished Middleaged and Young Scientist Award Foundation.