

# 量子点环的电子输运研究<sup>\*</sup>

邓宇翔<sup>1)</sup> 颜晓红<sup>2)†</sup> 唐娜斯<sup>1)</sup>

1) 湘潭大学材料与光电物理学院, 湘潭 411105)

2) 南京航空航天大学理学院, 南京 210016)

(2005 年 5 月 20 日收到, 2005 年 11 月 10 日收到修改稿)

利用非平衡格林函数方法, 研究了量子点环的相干输运性质. 结果表明: 与一维量子点阵列相比, 量子点环中的电子出现更多新的准束缚能级. 量子点间耦合的增强会使微分电导振荡出现退相干现象.

关键词: 量子点, 电导

PACC: 7320D, 7280

## 1. 引言

近年来, 随着现代微纳加工技术的发展, 人们可以根据性能要求设计并构造出各种具有优良特征的人造纳米结构和器件, 如量子点、量子线等. 这大大激发了人们对构造新型电子器件应用于量子信息和量子计算的兴趣, 特别是量子点系统的电子相干输运<sup>[1-5]</sup>问题. 由于在量子点系统中电子的输运尺度已达到了单电子波函数的相位相干长度, 电子运动的相干性成为影响量子器件工作原理的主要因素之一, 保持电子的波函数相干性对于量子点是否可能用于构造量子计算机也是至关重要的. 在电子隧穿通过量子点的实际过程中, 电子与许多其他粒子存在着相互作用, 例如带电的杂质原子、基片中的声子、来自环境的光子等. 量子点中电子相干性有可能会遭到这些“外部”作用的破坏. 这些有趣的现象使得量子点中电子态的相干问题和隧穿过程的相干问题引起了人们的特别关注. 1995 年 Yacoby 等<sup>[6]</sup>将量子点嵌入 AB 环臂中, 观测到了隧穿电流随磁场变化的振荡, 发现通过量子点的隧穿电流是部分相干的. 观察到通过单量子点隧穿电流的相干性对于揭示量子点相干隧穿的真实图像迈出了重要的一步. 此后, 耦合量子点系统中相干性问题的研究也取得了一些重要的进展. 这些系统包括耦合双量子点、一维量子点阵列等. 目前量子点实验制备得到

的主要是二维量子点阵列, 量子点电路结构也要比一维的情况复杂得多, 这些复杂系统必须考虑到分子电子态的隧穿相干性等问题, 目前这方面的工作还少有报道.

为反映二维量子点阵列及量子点电路等复杂结构中经由不同路径的隧穿电流相干的特性, 本文中我们提出了量子点环模型, 基于 Shangguan 等<sup>[7]</sup>的理论方法研究了该系统的相干输运特征. 该研究有助于理解复杂量子点结构中分子电子态的隧穿相干性问题, 对基于耦合量子点电路的量子计算能进一步做出可行性评价.

## 2. 模型和方法

我们所研究的量子点环模型是由  $N + M + 2$  个量子点首尾相连排列而成的环状结构, 如图 1 所示,  $N$  和  $M$  分别为上、下两臂的量子点数, 左右两端的电子库分别与量子点  $L, R$  相连,  $\Phi$  为量子点环所包围的磁通.

体系的哈密顿量表示为

$$H = \sum_{k, \alpha \in L, R} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^+ c_{k\alpha} + \sum_{i=1}^N \epsilon_i^0 d_i^+ d_i + \sum_{j=1}^M \epsilon_j^0 b_j^+ b_j + \sum_{i=1}^{N-1} V_{i, i+1} (e^{i\phi_{i+1}} d_i^+ d_{i+1} + e^{-i\phi_{i+1}} d_{i+1}^+ d_i) + \epsilon_L^0 d_L^+ d_L + \epsilon_R^0 d_R^+ d_R + V_{L1} (e^{i\phi_{L1}} d_L^+ d_1 + e^{-i\phi_{L1}} d_1^+ d_L) + V_{NR} (e^{i\phi_{NR}} d_N^+ d_R + e^{-i\phi_{NR}} d_R^+ d_N)$$

<sup>\*</sup> 教育部重点科技研究计划(批准号 204099)和教育部新世纪优秀人才支持计划(批准号 040779)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: xhyan@nuaa.edu.cn

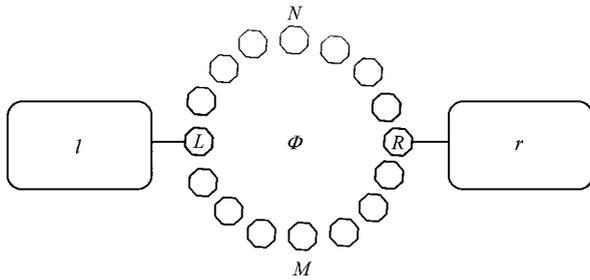


图 1 量子点环模型

$$\begin{aligned}
 & + U_{Ll} (e^{i\varphi_{Ll}} d_L^+ b_l + e^{-i\varphi_{Ll}} b_l^+ d_L) \\
 & + U_{MR} (e^{i\varphi_{MR}} b_M^+ d_R + e^{-i\varphi_{MR}} d_R^+ b_M) \\
 & + \sum_{j=1}^{M-1} U_{j,j+1} (e^{i\varphi_{j,j+1}} b_j^+ b_{j+1} + e^{-i\varphi_{j,j+1}} b_{j+1}^+ b_j) \\
 & + V_L (c_{kl}^+ d_L + d_L^+ c_{kl}) + V_R (c_{kr}^+ d_R + d_R^+ c_{kr}). \quad (1)
 \end{aligned}$$

在上述表达式中,  $d_i^+$  ( $d_i$ ),  $b_j^+$  ( $b_j$ ),  $d_L^+$  ( $d_L$ ),  $d_R^+$  ( $d_R$ ),  $c_{kl}^+$  ( $c_{kl}$ ),  $c_{kr}^+$  ( $c_{kr}$ ) 分别为环的上半部分量子点  $i$ 、环的下半部分量子点  $j$ 、量子点  $L$ 、量子点  $R$ 、左电子库、右电子库中的电子产生(湮没)算符, 这些算符的对易关系式为  $\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij}$ , 其中  $a_i \in \{d_i, b_j, d_L, d_R, c_{kl}, c_{kr}\}$ ,  $\epsilon_{i, \epsilon}^0, \epsilon_{j, \epsilon}^0, \epsilon_{L, \epsilon}^0, \epsilon_{R, \epsilon}^0$  分别为电子库和孤立量子点的能量, 其中  $k$  为波矢.  $V_{i, i+1}, U_{j, j+1}, V_L, V_R$  分别为上半部分相邻量子点间、下半部分相邻量子点间、量子点  $L$  与左电子库、量子点  $R$  与右电子库间的耦合系数.  $\phi_{i, i+1}$  ( $\varphi_{j, j+1}$ ) 为上(下)半部分中从量子点  $i$  ( $j$ ) 到量子点  $i+1$  ( $j+1$ ) 路径的相位, 并且和量子点环所包围的磁通  $\Phi$  相关 ( $\phi_{Ll} + \phi_{12} + \phi_{23} + \dots + \phi_{NR} - \varphi_{MR} - \dots - \varphi_{23} - \varphi_{12} - \varphi_{Ll} = 2\pi\Phi/\Phi_0$ ). 这里忽略电子-电子间的相互作用及自旋, 不影响对相干现象的理解.

根据非平衡格林函数方法<sup>[8]</sup>可以计算量子点环的隧穿电流. 该体系中的隧穿电流可写为

$$J_l = -e \dot{N}_l = -\frac{ie}{\hbar} [H, N_l], \quad (2)$$

式中,  $\dots$  表示系综平均,  $N_l$  为左电子库的粒子数算符,  $e$  为电荷. 将哈密顿量(1)式代入(2)式, 化简后可得

$$J_l = \frac{2e}{\hbar} \text{Re} [V_L G_{L, l}(t, t')], \quad (3)$$

式中关联格林函数定义为

$$G_{L, l}(t, t') = i c_{kl}^+(t') d_l(t). \quad (4)$$

作傅里叶变换并经过简单代数运算(3)式可整理成如下形式(为简单起见, 此后我们省去  $J_l$  的下标  $l$ ):

$$J = \frac{ie}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Gamma_l \{f_l(\epsilon) [G_{Ll}^r(\epsilon) - G_{Ll}^a(\epsilon)] + G_{Ll}(\epsilon)\}, \quad (5)$$

式中  $G_{Ll}^r(\epsilon) = [G_{Ll}^a(\epsilon)]^*$  为推迟格林函数.

$$\begin{aligned}
 G_{i, i}^r(t) &= -i\theta(t) \{d_i(t), d_i^+(t)\} \\
 (i &= L, 1, 2, \dots, N, R). \quad (6)
 \end{aligned}$$

这里,

$$f_{\kappa r}(\epsilon) = \{1 + \exp[(\epsilon - \mu_{\kappa r})/k_B T]\}^{-1}$$

为左(右)电子库的费米函数,

$$\Gamma_l = 2\pi V_L^* V_L \delta(\epsilon - \epsilon_{kl})$$

为线宽函数. 在推导过程中, 引入了宽带近似<sup>[5]</sup>, 亦即线宽  $\Gamma_l$  不依赖于电子能量.

根据 Dyson 方程, 可以精确求得量子点  $L$  的推迟格林函数. 由推迟格林函数  $G_{Ll}^r(\epsilon)$  利用 Keldysh 公式<sup>[9]</sup>, 可以求出量子点  $L$  的关联格林函数

$$\begin{aligned}
 G_{Ll}(\epsilon) &= [f_l(\epsilon) - f_l(\epsilon)] \Gamma_l |G_{Ll}^r(\epsilon)|^2 \\
 &- f_l(\epsilon) [G_{Ll}^r(\epsilon) - G_{Ll}^a(\epsilon)]. \quad (7)
 \end{aligned}$$

把(7)式代入电流公式(5)中, 最后得到与 Landauer-Büttiker 公式相似的电流公式,

$$\begin{aligned}
 J &= -\frac{e}{\hbar} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} [f_l(\epsilon) - f_r(\epsilon)] \Gamma_l \left(\frac{\epsilon}{\hbar}\right) \\
 &\times \left\{ 2\text{Im} [G_{Ll}^r(\epsilon) + \Gamma_l \left(\frac{\epsilon}{\hbar}\right) |G_{Ll}^r(\epsilon)|^2] \right\}. \quad (8)
 \end{aligned}$$

### 3. 计算与讨论

为了便于讨论, 选取右电子库化学势恒定 ( $\mu_r = 0$ ), 量子点环中的各量子点位能选取相同 ( $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \dots = \epsilon_N$ ), 量子点之间及量子点与电子库之间的各耦合系数也相等 ( $V_{i, i+1} = U_{j, j+1} = V_L = V_R = V$ ), 并且上下两半部分量子点数目一样 ( $N = M$ ). 宽带近似下,  $\Gamma_l = \Gamma_r = \Gamma$ , 在以下数值计算中所有能量的值均以  $\Gamma$  为单位.

图 2 示出了低温下 ( $1/k_B T = 100$ ) 量子点环微分电导随上下两臂环中量子点数改变的情况. 在计算过程中我们取  $\epsilon = -2.0, V = 6.0$ . 从图 2 可以看出, 共振峰出现在以量子点位能为中心, 宽度大约为  $4V$  的范围内. 随着量子点数目增多, 共振峰的数目也增多. 这与一维量子点阵列<sup>[7]</sup>的隧穿谱特征类似.

由于费米分布是温度的函数, 不同的温度, 量子点环的微分电导将会有明显变化. 图 3 对比了低温和高温两种条件下量子点环的微分电导随左电子库

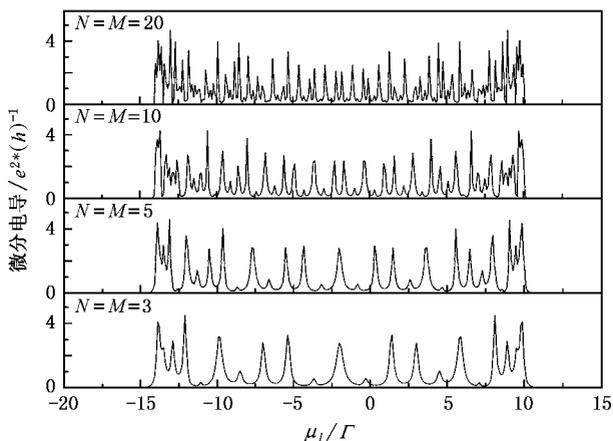


图2 低温下 ( $1/k_B T = 100$ ) 量子点环的电导随量子点数目变化

化学势的变化。在计算过程中我们取  $\epsilon = -2.0$ ,  $N = M = 5$ , 低温条件下取  $1/k_B T = 100$ , 高温条件下取  $1/k_B T = 1$ 。低温条件下, 微分电导曲线由许多分立的共振峰组成, 这些共振峰分布在  $\epsilon \pm 2V$  的范围内。高温条件下电导峰的宽度超出了  $\epsilon \pm 2V$  的范围而峰高明显降低, 微分电导曲线变为平滑的曲线。这种变化是由于随着温度的升高, 量子点环系统中能级变得连续起来, 所以微分电导曲线由分立的共振峰变为平滑的曲线。这与一维量子点阵列<sup>[7]</sup> 高低温条件下微分电导曲线的变化情况类似。

为了比较量子点环与一维量子点阵列的隧穿谱特征, 图4对比了量子点环及一维量子点阵列的微分电导随左电子库化学势的变化。为方便比较, 考虑两种系统中量子点数目相同, 并且都处于低温条件下 ( $1/k_B T = 100$ )。比较量子点环隧穿谱中各共振峰, 有一部分共振峰明显低于其他的共振峰, 我们称之为副峰。量子点环的副峰个数不仅与相应的一维量子点阵列的共振峰个数相同, 并且位置也比较相近, 存在一一对应的关系。量子点环隧穿谱中还存在一部分相对较高的共振峰称为主峰。这表明与一维量子点阵列相比, 量子点环系统中形成了更多新的准束缚态能级, 并且这些新能级更有利于共振隧穿的发生。进一步分析可知, 由于量子点环相当于同样数目的一维量子点阵列首尾相连而成, 所以量子点环中存在与一维量子点阵列类似的准束缚态能级(对应于副共振峰)。但是通过量子点环上下两路径的电子波会发生相干, 这种量子点环中上下两部分量子点系统的相互影响与一维量子点阵列中的点间耦合不同, 所以引起了共振能级的进一步分裂, 出现了新的准束缚态能级(对应于主共振峰), 同时原有的准束缚态能级即副共振峰的位置和峰值也发生了变化。由于相干作用, 同时通过上下两路径的隧穿(同时隧穿)得到了增强, 类似于双量子点分子<sup>[10]</sup> 的情形。这也就是主峰比副峰高得多的原因。

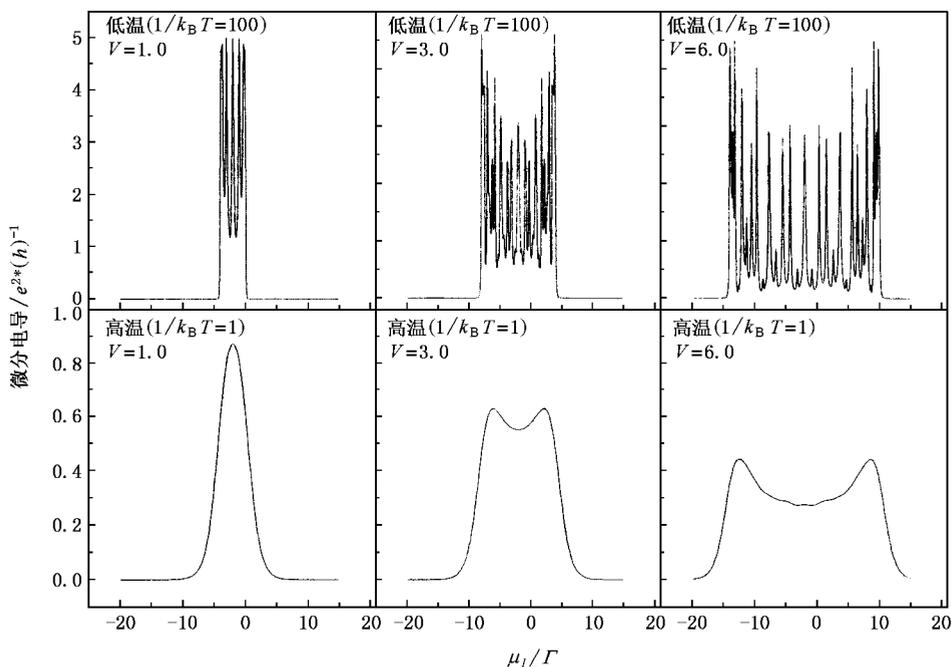


图3 量子点环电导在高低温条件下的比较

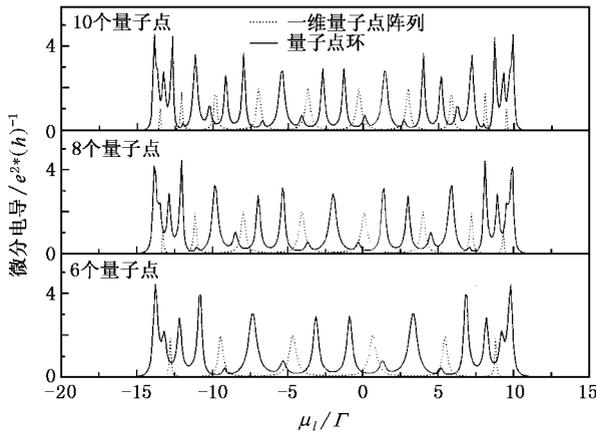
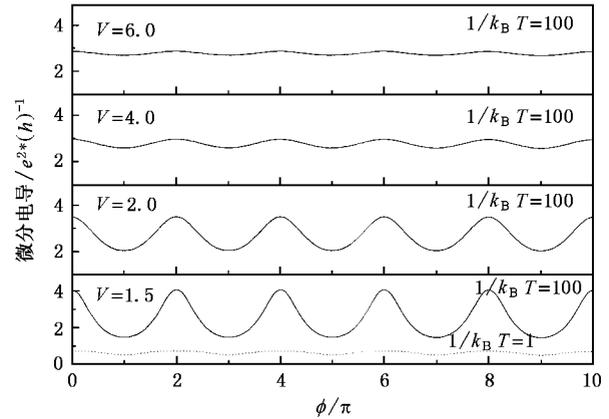


图4 量子点环和一维量子点阵列电导的比较

图5示出了共振隧穿时微分电导随磁场变化的情形,图中实线所表示的是低温条件( $1/k_B T = 100$ )下的情况,虚线所表示的是高温条件( $1/k_B T = 1$ )下的情况.随着磁场的变化,微分电导产生周期为 $2\pi$ 的振荡,这是AB效应的重要特征之一.这是因为量子点环中的电子在共振隧穿的过程中,当未到达右端电子库时,由于尚未完全失去对相位的记忆,外加磁场沿环产生相位差 $2\pi\Phi/\Phi_0$ ,于是在相干隧穿过程中出现电导随磁通 $\Phi$ 变化呈周期性振荡的AB效应.同时我们发现:随着量子点间耦合系数的增大,AB效应逐渐减弱,当耦合系数足够大时,AB效应将会消失.这是因为随着量子点间耦合系数的增大,量子点环由耦合的量子点系统过渡到一个“大的量子点”<sup>[3, 11-13]</sup>.此时,单个量子点不再有电子能级和电荷的量子化,电子也不能被看作是一个粒子位于一个特定的量子点内,而应视为一个分布在整个体系内的相干波.因此AB效应逐渐减弱直至消失.另外我们做了耦合强度较小( $V = 1.5$ )时高温和低温条件下微分电导的对比.这里没有做出其他耦合条件下的对比是因为其他情况是类似的,且由于高温条件下电导值较低不便于比较.通过比较耦合强度较小( $V = 1.5$ )时高温条件下及低温条件下的微分电导曲线,我们发现由于温度的升高微分电导降低并且随磁场变化的振荡也减弱,但曲线的其他特征如振荡周期等没有什么变化.因此在下面关于外磁场影响微分电导的讨论中,我们只考虑低温的情况.

图6进一步示出了量子点环隧穿谱中各主峰随磁场变化的情况.从图6可看出,对应于各主共振峰的准束缚态能级处,微分电导随磁场变化而产生

图5 量子点环( $N = M = 5$ )电导随磁场的变化

AB振荡,并且在某些能级会振荡得更强烈.

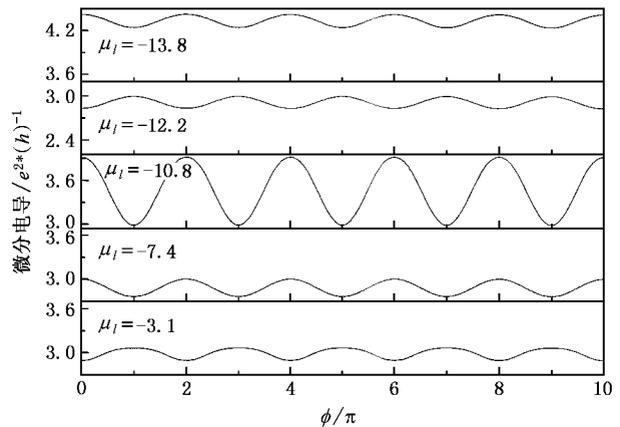
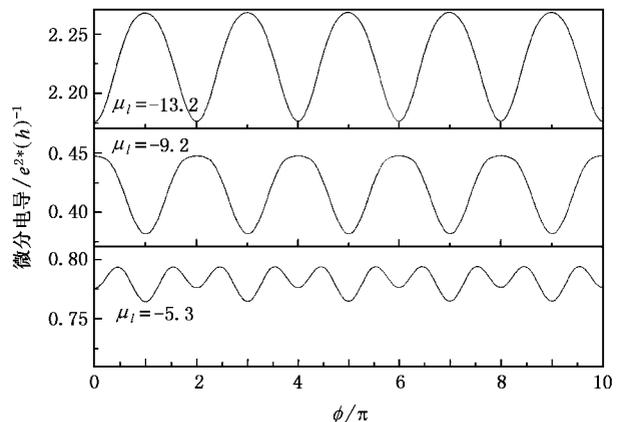
图6 量子点环( $N = M = 2$ )主共振峰随磁场的振荡变化

图7示出了各副峰随磁场变化的情况.从图7中可知,对应于副共振峰各个准束缚态能级处,微分电导也产生AB振荡,但与主峰振荡相比,副峰振荡要弱得多,并且在某些能级还出现了周期为 $\pi$ 的

图7 量子点环( $N = M = 2$ )副共振峰随磁场的振荡变化

振荡.这是由于对应于主峰的准束缚态能级电子的隧穿过程是电子波函数同时通过量子点环的上、下两条路径传播到达右端,是相干隧穿,而对应于副峰的准束缚态能级电子的隧穿过程类似于一维量子点阵列中的情形.所以主峰的 AB 振荡要比副峰的振荡强烈得多.

## 4. 结 论

为研究量子点电路的相干性问题,构造了量子点环的理论模型.利用非平衡格林函数方法,导出了隧穿电流的一般解析式,研究了量子点环的电子相干输运特征.结果表明:与一维量子点阵列类似,量子点环共振峰的数目和量子点数目相关,发生共振隧穿的准束缚态能级范围在 $(\epsilon - 2V, \epsilon + 2V)$ 内;

但量子点环中形成了更多新的准束缚态能级,并且更有利于共振隧穿的发生.这是由于分别经过量子点环中上、下两条路径的隧穿电子波函数在未进入右端电子库时,尚未完全丧失对相位的记忆,产生相干引起的.所以在通过量子点环的磁通变化时,会观察到微分电导的 AB 振荡,并且 AB 振荡会随着温度的升高而减弱.当量子点间耦合系数逐渐增大后,由于量子点环由耦合量子点系统过渡到“大量子点”,于是 AB 振荡逐渐减弱直至消失.通过比较量子点环隧穿谱上共振主峰及副峰 AB 振荡的强弱,我们推测对应于主峰的准束缚态能级电子隧穿属于同时隧穿的情形,而对应于副峰的准束缚态能级电子隧穿相当于一维量子点阵列中的电子隧穿情况,这也是主峰的 AB 振荡比副峰的振荡要强烈得多的原因.

- [1] Wu Z J, Zhu K D, Yuan X Z *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3346 (in Chinese)[吴卓杰、朱卡的、袁晓忠等 2005 物理学报 **54** 3346]
- [2] Du L, Zhuang Y Q 2004 *Nanoelectronics* (Beijing: Electronic Industry Press)(in Chinese)[杜磊、庄奕琪 2004 纳米电子学(北京:电子工业出版社)]
- [3] Wu S Q, Chen X W, Sun W L *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2336 (in Chinese)[吴绍全、谌雄文、孙威立等 2004 物理学报 **53** 2336]
- [4] Visscher E H, Lindeman J, Verbrugh S M *et al* 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 2014
- [5] Krupenin V A, Lotkhov S V, Presnov D E 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 3212

- [6] Yacoby A, Heiblum M, Mahalu D *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4047
- [7] Shangguan W Z, Au Yeung T C, Yu Y B *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **63** 235323
- [8] Haug H, Jauho A P 1998 *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Berlin: Springer-Verlag)
- [9] Keldysh L V 1964 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47** 1515
- [10] Holleitner A W 2002 *Science* **297** 70
- [11] Crouch C H, Livermore C, Westervelt R M *et al* 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 817
- [12] Xiong S J, Xiong Y 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1407
- [13] Waugh F R, Berry M J, Mar D J *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 705

# Electron transport through a quantum dot ring<sup>\*</sup>

Deng Yu-Xiang<sup>1)</sup> Yan Xiao-Hong<sup>2)†</sup> Tang Na-Si<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> *Faculty of Material and Photoelectric Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*

<sup>2)</sup> *College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China*

(Received 20 May 2005; revised manuscript received 10 November 2005)

## Abstract

Based on the non-equilibrium Green function formalism, we studied the coherent transport through a quantum dot ring. Compared with a one-dimensional quantum dot array, a quantum dot ring presents a number of new quasi-bounding-states in its electronic spectra. Moreover, the enhancement of the inter-dot coupling would lead to the prominent decoherence of Coulomb-blockade conductance oscillation.

**Keywords** : quantum dot, conductance

**PACC** : 7320D, 7280

---

<sup>\*</sup> Project supported by the Key Technology Development Program of Ministry of Education of China (Grant No. 204099) and the Program for the New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education of China (Grant No. 040779).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: xhyan@nuaa.edu.cn