

磁场方向调制的 InAs 量子点分子量子比特^{*}

董庆瑞[†]

(山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

(2006 年 11 月 9 日收到, 2007 年 1 月 9 日收到修改稿)

在有效质量近似条件下研究了由两个垂直耦合自组织 InAs 量子点组成的双电子量子点分子的电子结构, 在此基础上利用系统的总自旋提出了一种磁场方向调制的量子比特方案. 电子的相关效应可以导致系统的总自旋在 0 和 1 之间转换, 值得注意的是, 通过调节外部磁场的方向来实现这种转换, 而不是像以往那样通过改变外部磁场的大小. 结果支持利用系统的总自旋作为磁场方向调制的量子比特的可能性, 而且因为高质量的垂直耦合量子点分子的制作工艺已经成熟, 所以这是一个非常现实的量子比特设计方案.

关键词: 量子点分子, 磁场方向调制, 量子比特

PACC: 7320D, 7360J

1. 引 言

半导体量子点在物理上类似于具有原子核和束缚电子的原子体系, 也正是因为这个原因, 量子点经常被称为“人造原子”. 作为原子比喻的拓展, 耦合在一起的多量子点体系也被称“人造分子”^[1]. 人们已经在耦合量子点分子的分子轨道方面作了深入的理论研究^[2-7], 其中 Harju 等人^[6]研究了由两个平行耦合量子点组成的量子点分子在外部磁场中的电子结构, 并且利用这种量子点分子的总自旋设计了一种可用于量子计算的量子比特. Korkusinski 和 Hawrylak^[8]在质量有效近似和绝热近似下利用传递矩阵的方法计算了垂直耦合双量子点的电子结构. 人们在实验方面^[9-11]也作了大量的研究, 其中“indium-flush”技术^[9]的发展, 使高质量垂直耦合盘形量子点的制造成为可能. 这种垂直生长的量子点结构在制造光存储器件^[12], 量子点激光器^[13, 14]和量子计算^[15-19]方面具有广阔的应用前景.

本文在有效质量近似条件下研究了由两个垂直耦合自组织 InAs 量子点组成的量子点分子的双电子电子结构. 人们对这种结构的量子点分子在磁场中的电子结构已经有所认识, 但这些研究中所涉及的磁场仅限于垂直^[19]和平行^[8]两个方向, 而本文引

入任意方向的外加磁场, 并且把磁场作为系统的有效势来处理. 本文的工作可以看作我们以前工作^[19]在磁场方向方面的推广. 我们的计算结果表明, 电子的相关效应可以导致系统的总自旋在 0 和 1 之间转换. 值得注意的是, 我们是通过调节外部磁场的方向来实现这种转换, 而不是通过改变外部磁场的大小^[6]. 我们的结果支持利用系统的总自旋作为磁场方向调制的量子比特的可能性, 而且因为高质量的垂直耦合量子点分子的制作工艺已经成熟, 所以这是一个非常现实的量子比特设计方案.

2. 物理模型与理论

图 1 为 InAs/GaAs 耦合双量子点结构示意图. 两个量子点分别生长在厚度为 W 的浸润层 (WL) 上, 并且被 GaAs 势垒层覆盖. 两个量子点具有相同的高度 H (一般为 1—2 nm) 和相同的半径 R (一般为 7—12 nm). 两个浸润层之间的距离为 D , 两个量子点之间的隧穿势垒厚度为 $D - H$. GaAs 势垒和 InAs 量子点之间导带偏移量构成了量子点的限制势 V_0 . 量子点和浸润层的有效里德伯常数为 $R_y = m_e e^4 / 2\epsilon^2 \hbar^2$, 有效波尔半径为 $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$, 其中 m_e 和 ϵ 分别是电子有效质量和介电常数. 在本文的计算中, 我们把 R_y 和 a_B 作为能量和长度的单位.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10674084)资助的课题.

[†] E-mail: qrdong@semi.ac.cn

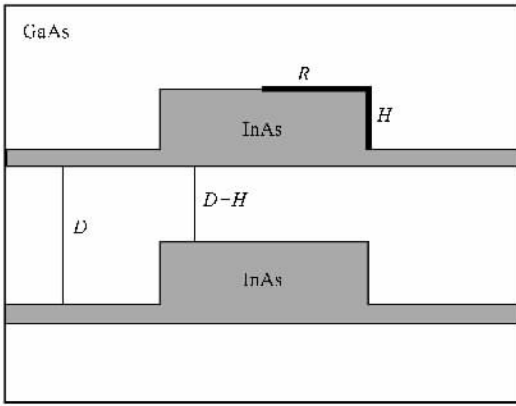


图1 耦合 InAs/GaAs 双量子点结构示意图(量子点的半径为 R , 高度为 H , 浸润层的间隔为 D)

首先,我们采用有效质量近似方法,研究任意方向外加磁场下单电子量子点分子的电子结构.若选择异质结的生长方向为 z 方向,外部磁场可表示为 $\mathbf{B} = B(0, \cos\alpha, \sin\alpha)$,其中 α 为相对于 y 轴的极化角.取矢势 $\mathbf{A} = (Bz\cos\alpha - By\sin\alpha/2, Bx\sin\alpha/2, 0)$,柱状坐标系下的薛定谔方程可表示为

$$\hat{H}\psi(r, \theta, z) = E\psi(r, \theta, z), \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{\Omega \sin\alpha}{2\hbar} l_z \\ & + \frac{\Omega^2 R_y m_e \sin^2 \alpha}{8\hbar} r^2 + \frac{\Omega^2 R_y z^2}{2m_e \hbar^2} \cos^2 \alpha \\ & - \frac{\Omega^2 R_y z r}{2m_e \hbar^2} \sin\alpha \cos\alpha \sin\theta \\ & + i\Omega_z \cos\alpha \left(\frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\cos\theta \partial r} \right) \\ & - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(r, z), \end{aligned} \quad (2)$$

在浸润层和量子点内部 $V(r, z) = -V_0$,在势垒层 $V(r, z) = 0$,其中 $\Omega = w_c / R y$, $w_c = \hbar e B / m_e c$.式中第一项对应电子在垂直于生长方向平面内的运动,第二项到第五项为磁场产生的有效势,第六项对应电子在生长方向的运动.为了解方程^[1],我们将 H 分成两部分:

$$\begin{aligned} H^{(1)} = & -\frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{\Omega \sin\alpha}{2\hbar} l_z \\ & + \frac{\Omega^2 R_y m_e \sin^2 \alpha}{8\hbar} r^2 \\ & - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(r, z), \end{aligned} \quad (3)$$

和

$$\begin{aligned} H^{(2)} = & \frac{\Omega^2 R_y z^2}{2m_e \hbar^2} \cos^2 \alpha \\ & - \frac{\Omega^2 R_y z r}{2m_e \hbar^2} \sin\alpha \cos\alpha \sin\theta \\ & + i\Omega_z \cos\alpha \left(\frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\cos\theta \partial r} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

我们首先得到哈密顿量 $H^{(1)}$ 的本征函数,然后以此为基矢,得到哈密顿量 H 的矩阵形式,通过矩阵的对角化方法,可以得到 H 的本征函数和本征值.

对于量子点分子的双电子系统,在不考虑自旋的情况下,其哈密顿量可表示为

$$H = H_1 + H_2 + \frac{e^2}{\epsilon r_{12}}, \quad (5)$$

其中 H_1 和 H_2 是上述单电子系统的哈密顿量,其具体形式符合方程(2).磁场与 S_z 的塞曼耦合项将在后面说明.利用单电子系统的本征函数 $\psi(r, \theta, z)$,自旋为 S 的双电子系统的波函数可用以下形式展开^[19]:

$$\begin{aligned} \Psi_S(r_1, r_2) = & \sum_{i \leq j} \alpha_{i,j} \{ \psi_i(r_1, \theta_1, z_1) \psi_j(r_2, \theta_2, z_2) \\ & + (-1)^S \psi_i(r_2, \theta_2, z_2) \psi_j(r_1, \theta_1, z_1) \}, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $S = 0$ 对应对称态, $S = 1$ 对应反对称态.在这个波函数的表达式中,并没有自旋的对应部分,接下来的计算也是与自旋无关的.通过解一个一般的本征值问题,可以得到第 l 个本征态对应的系数 α_l 以及本征能量 E_l .通过改变基矢的数目,可以检查计算结果的收敛情况,并且发现在计算两个能量最低的双电子态的过程中,采用四个能量最低的单电子态作为基矢,就能使计算结果很好的收敛,这是因为这两个双电子态在根据方程^[6]展开的过程中,其主要组成部分就是这四个单电子态.通过选择更多的基矢,我们还可以得到更多的双电子态.

3. 结果与讨论

系统两个能量最低的双电子态随外部磁场 ($B = 17$ T) 方向的变化关系如图2所示.计算中采用以下参数,量子点的高度 $H = 2$ nm,量子点间距 $D = 7.5$ nm,量子点半径 $R = 12$ nm,限制势 $V_0 = 1$ eV,对应 InAs 和 GaAs 的导带偏移量,无应变的 InAs 电子有效质量为 $m_e = 0.023 m_0$,GaAs 的电子有效质量为 $m_e = 0.067 m_0$.磁场方向的变化范围: $\alpha = 0^\circ - 180^\circ$,两个电子态具有不同的自旋 $S = 1$ 和 $S = 0$.当 $\alpha =$

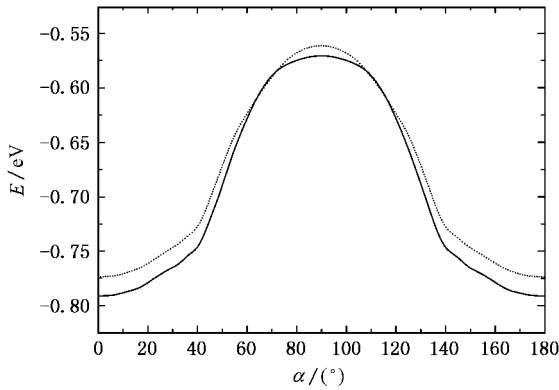


图2 两个能级最低的双电子态随外部磁场($B = 17\text{ T}$)方向变化的关系(计算中采用的结构参数为 $H = 2\text{ nm}$, $D = 7.5\text{ nm}$ 和 $R = 12\text{ nm}$. α 是相对于 y 轴的极化角. 自旋为 $S = 0$ 的态用实线来表示, 自旋为 $S = 1$ 的态用虚线来表示)

0(180°)时, $S = 0$ 态的能量比 $S = 1$ 态的能量低, 随着磁场方向朝着 z 方向偏转, 两个双电子态的能量彼此接近. 在 $\alpha = 64^\circ - 72^\circ$ 和 $108^\circ - 116^\circ$ 两个磁场方向范围内, $S = 0$ 态的能量比 $S = 1$ 态的能量高, 我们可以通过单电子态随磁场方向的依赖关系来解释这种基态的转换. 随着磁场方向朝着 z 偏转, 单电子态的能级彼此靠近, 由于这些单电子态是双电子态的主要组成部分, 于是双电子态的能级也彼此靠近. 如果不考虑电子的相互作用, $S = 0$ 态的能量将永远比 $S = 1$ 态的能量低, 因为 $S = 0$ 态的两个电子可以同时占据单电子能级的基态, 而 $S = 1$ 态的两个电子由于泡利原理的限制不能同时占据单电子能级的基态. 当考虑了电子间的相互作用效应以后, 由于两个双电子态的相互作用能不同, 导致了在某些磁场方向范围 $S = 0$ 态的能量比 $S = 1$ 态的能量高, 于是出现了双电子态基态自旋的转换. 下面我们再来说明塞曼项的影响, 塞曼项导致 $S = 1$ 态的能量降低了大约 $60\ \mu\text{eV/T}$, 对 $S = 0$ 态的能量没有改变, 考虑到能级的数量级, 塞曼项的影响是可以忽略的.

双电子系统 $S = 0$ 态和 $S = 1$ 态的能量差 ΔE 如图3所示, 计算中采用以下参数: 量子点的高度 $H = 2\text{ nm}$, 量子点间距 $D = 7.5\text{ nm}$, 量子点半径 $R = 12\text{ nm}$. 因为双电子体系的基态自旋或者是 $S = 0$ 或者是 $S = 1$, 所以能通过调整外部磁场的方向来改变系统基态的自旋. 这种体系基态在 $S = 0$ 态和 $S = 1$ 态之间的转换, 允许我们把体系的基态自旋作为量子比特^[6, 20], 而且可以通过改变外部磁场的方向来产生任意的单量子比特旋转. 通过改变体系的结构参数, 我们还可以得到 $S = 0$ 态或者 $S = 1$ 态作为

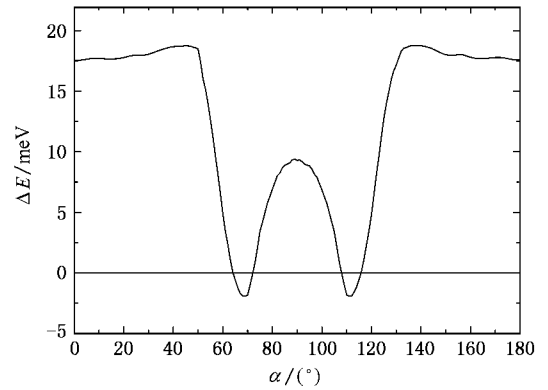


图3 单态和三重态之间的能量差 ΔE 随外部磁场($B = 17\text{ T}$)方向变化的关系(计算中采用的结构参数为 $H = 2\text{ nm}$, $D = 7.5\text{ nm}$ 和 $R = 12\text{ nm}$. α 是相对于 y 轴的极化角)

基态所对应的不同磁场方向范围; 在结构参数确定的条件下, 我们仍然可以通过改变磁场的强度来得到 $S = 0$ 态或者 $S = 1$ 态作为基态所对应的不同磁场方向范围. 在图4中, 我们给出了能级差 ΔE 随磁场强度的变化关系, 随着磁场的增强, $S = 1$ 态所对应的两个谷彼此远离, 同时 $S = 0$ 态所对应的峰升高了, 这是因为, 随着磁场的增强, 磁场的 z 方向分量也增强了, 而该分量决定了能级的高低, 间接决定了能级差 ΔE 的大小. 因为本文量子点的典型尺寸比文献6的外部限制势小得多, 能级差 ΔE 得最大值是文献6]能级差 ΔE 得最大值的至少10倍, 较高能级差有利于降低量子比特操作对精度的要求, 同时随着磁场方向的变化, 基态的自旋出现了几次转换, 也增加了量子比特操作的自由度. 而且因为高质量的垂直耦合量子点分子的制作工艺已经成熟, 所以这是一个非常现实的量子比特设计方案.

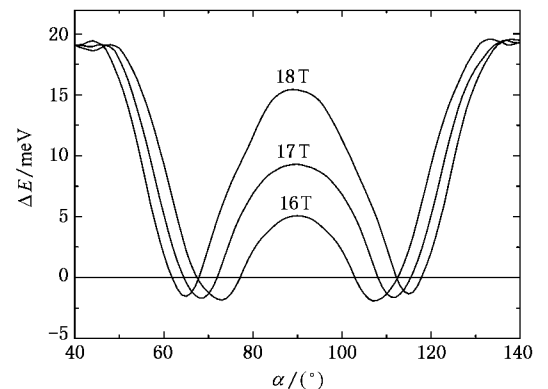


图4 单态和三重态之间的能量差 ΔE 随外部磁场($B = 17\text{ T}$)方向变化的关系(计算中采用的结构参数为 $H = 2\text{ nm}$, $D = 7.5\text{ nm}$ 和 $R = 12\text{ nm}$. α 是相对于 y 轴的极化角. 图中的三条曲线分别对应三个不同的磁场强度($B = 17\text{ T}$, 18 T , 19 T))

4. 结 论

本文在有效质量近似条件下研究了由两个垂直耦合自组织 InAs 量子点组成的量子点分子的电子结构. 我们引入任意方向的外加磁场, 并且把磁场作为系统的有效势来处理. 我们的计算结果表明: 电子的相关效应可以导致系统的总自旋在 0 和 1 之间转换. 我们是通过调节外部磁场的方向来实现这种转

换, 而不是象以往那样通过改变外部磁场的大小. 我们的结果支持利用系统的总自旋作为磁场方向调制的量子比特的可能性. 较高能级差出现, 有利于降低量子比特操作对精度的要求, 同时随着磁场方向的变化, 基态的自旋出现了几次转换, 也增加了量子比特操作的自由度. 而且因为高质量的垂直耦合量子点分子的制作工艺已经成熟, 所以这是一个非常现实的量子比特设计方案.

-
- [1] Kastner M A 1993 *Phys. Today* **46** (1) 24
- [2] Palacios J J , Hawrylak P 1995 *Phys. Rev. B* **51** 1769
- [3] Tokura Y , Austing D G , Tarucha S 1999 *J. Phys. C* **11** 6023
Bryant G W 1993 *Phys. Rev. B* **47** 1683
- [4] Pryor C 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3579
- [5] Fonseca L R C , Jimenez J L , Leburton J P 1998 *Phys. Rev. B* **58** 9955
- [6] Harju A , Siljamäki S , Nieminen R M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 226804
- [7] Ni H Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1474 (in Chinese) [倪海桥 2004 *物理学报* **53** 1474]
- [8] Korkusinski M , Hawrylak P 2001 *Phys. Rev. B* **63** 195311
- [9] Wasilewski Z R , Fafard S , McCaffrey J P 1999 *J. Cryst. Growth* **201** 1131
- [10] Blick R H , Pfannkuche D , Haug R J , Klitzing K V , Eberl K 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4032
- [11] Luyken R J , Lorke A , Fricke M , Kotthaus J P , Medeiros-Ribeiro G , Petroff P M 1999 *Nanotechnology* **10** 14
- [12] Lundstrom T , Schoenfeld W , Lee H , Petroff P M 1999 *Science* **286** 2312
- [13] Dong Q R 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1794 (in Chinese) [董庆瑞 2005 *物理学报* **54** 1794]
- [14] Fafard S , Wasilewski Z R , Allen C N , Hinzer K , McCaffrey J P , Feng Y 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 986
- [15] Burkard G , Seelig G , Loss D 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2581
- [16] Dong Q R , Li S S , Niu Z C , Feng S L 2006 *Physica E* **33** 230
- [17] Hawrylak P , Fafard S , Wasilewski Z R 1999 *Condens. Matter News* **7** 16
- [18] Burkard G , Seelig G , Loss D 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2581
- [19] Dong Q R , Li S S , Niu Z C , Feng S L , Zheng H Z 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 3277
- [20] Burkard G , Loss D , DiVincenzo D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 2070

Two-electron InAs quantum-dot-molecular qubit modulated by the orientation of magnetic fields ^{*}

Dong Qing-Rui[†]

(*College of Physics and Electronics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China*)

(Received 9 November 2006 ; revised manuscript received 9 January 2007)

Abstract

The electronic structure of a two-electron quantum-dot molecular has studied using the effective mass approximation. The quantum-dot molecular consists of two vertically coupled self-assembled quantum disks in a magnetic field with varying orientation. Based on the calculation, a qubit modulated by the orientation of magnetic field is proposed with the total spin of the system. Electron correlations may lead to the switching of the total spin between $S = 0$ and $S = 1$ states. The switching is realized not by the changing strength but by the changing orientation of an external magnetic field. Our results provide a possibility to use the total spin of the system as a qubit modulated by varying the orientation of the magnetic field. Since high-quality vertically stacked quantum disks can be fabricated successfully, it is realistic to obtain qubits of this type.

Keywords : quantum dot molecular, modulated by the orientation of magnetic fields, qubit

PACC : 7320D, 7360J

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.10674084).

[†] E-mail : qrdong@semi.ac.cn