

串联耦合三量子点的电荷稳态研究*

周正 黄少云†

(北京大学电子学院, 纳米器件物理与化学教育部重点实验室, 固态量子器件北京市重点实验室, 北京 100871)

(2022 年 7 月 26 日收到; 2022 年 10 月 3 日收到修改稿)

串联耦合三量子点 (serial triple quantum dots, STQD) 体系在近十年来受到人们的广泛关注, 这不仅是提高量子点集成度的一个必然过程, 更重要的是可以利用 STQD 中一些特定的电荷占据态来实现自旋量子比特的快速全电学调控. 本文运用常相互作用模型, 导出了与外部可观测物理量相关的 STQD 电化势, 借助数值模拟计算得到 STQD 在不同中间栅电压下的线性输运二维电荷稳态图 (简称二维稳态图), 着重研究 STQD 的各种电荷占据态之间的能量简并点 (简称能量简并点), 结合实验将 STQD 中的能量简并点归纳为三种类型, 对这些能量简并点的深入理解可以指导实验高效地寻找 STQD 体系中适合量子计算的工作区.

关键词: 串联三量子点, 二维稳态图, 常相互作用模型**PACS:** 73.23.-b, 73.23.Hk, 73.63.Kv, 85.35.Gv**DOI:** 10.7498/aps.72.20221512

1 引言

量子计算在理论层面的不断完善和技术层面的不断发展, 吸引了越来越多的实验工作寻找量子计算的物理实现, 即在硬件上实现量子计算的方案^[1-3]. 基于半导体量子点的自旋量子比特方案^[4], 能借助现有成熟的半导体工艺技术^[5], 并且在扩展性与可调控性等方面具有潜在优势, 自从 1998 年被理论提出后, 已经发展成为实现固态量子计算极具潜力的方案之一^[6,7].

经过最初十几年的探索, 这一领域内的研究人员已经可以在单量子点^[8]和双量子点^[9-13]中实现量子比特的初始化-操纵-读出过程. 2000 年, 美国 IBM T. J. Watson 研究中心的 DiVincenzo 等^[14]在理论上提出, 利用三个电子的自旋态作为一个量子比特, 仅借助海森堡交换相互作用就可以实现高速的量子比特操作, 从而可以极大地减小由于复杂的材料或者器件结构带来的退相干效应, 这一实现量子比特操作的方案被称为交换量子比特 (exchange-

only qubit) 方案^[15]. 2006 年, 加拿大国家研究理事微结构科学研究所的 Gaudreau 等^[16]在实验上偶然构筑了串联三量子点体系 (serial triple quantum dots, STQD), 为进一步研究三个电子自旋态的相互作用提供了实验基础. 2010 年, 他们在实验上构筑了高度可调控的 STQD, 并对三量子点的不同电荷占据态进行了初步分析^[17]. 2013 年, 哈佛大学的 Marcus 等^[18]借助 STQD 的 (201), (111) 和 (102) 三个电荷占据态实现了三电子自旋的交换量子比特. 2017 年, 中国科学技术大学的郭国平教授研究组^[19]在实验中借助三量子点的 (7, 1, 3) 和 (6, 2, 3) 等电荷态进一步研究了混合量子比特. 显然, 深刻理解 STQD 各种电荷占据态之间的关系, 对于高效地调控得到量子计算所需要的工作区至关重要. 电荷占据态由与各个栅电压相关的电荷稳态图 (stability diagram) 来描述^[16], 严格来说, 三量子点的电荷稳态图是一个关于三个栅电压变化的三维图形^[20,21]. 实验上完全得到这样的三维图形需要极大的工作量, 故通常采取设定中间栅电压不变, 通过改变两端两个栅电压的大小来得到

* 国家自然科学基金 (批准号: 11974030, 92165208)、北京市自然科学基金 (批准号: 1202010) 和国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2017YFA0204901) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: syhuang@pku.edu.cn

STQD 的线性输运二维稳态图 (以下简称二维稳态图), 即三维电荷稳态图的一个二维切面 [17–22], 显然中间量子点的从动状态使得这样的二维稳态图提供的信息有限. 早期的三量子点体系中, 对电荷占据态及其能量简并点的讨论主要围绕实验上有限几个结果并配合一定的数值模拟进行 [17–22]. 实验上的稳态图受限于温度效应和量子效应对能级的扩展, 简并点附近的量子隧穿产生的能级交叉, 以及隧穿电流较低等因素 [22], 目前还缺乏在这个体系中对电荷占据态及其能量简并点的系统讨论 [21], 特别是对简并点之间连续演化过程的理解, 这些问题对快速准确地确定量子计算工作区带来了极大的挑战. 理论上, 借助常相互作用模型并通过数值模拟计算, 可以得到三维电荷稳态图的任意一个二维截面, 需要的计算时间远远低于实验上的测量时间, 结合少量实验结果, 就可以高效协助实验上寻找 STQD 合适的量子计算工作区.

本文以一定的实验参数为依据, 运用常相互作用模型, 借助数值模拟计算的电势分布图, 得到了 STQD 在不同中间栅电压下的二维稳态图, 消除了实验上隧穿电流较低等不利因素影响, 分类对能量简并三重点和四重点进行了系统讨论, 并给出形象化的对应电势示意图, 更直观地讨论 STQD 不同电荷占据态的关系以及能量简并点的性质, 最后与文献中的实验结果对照, 在检验理论计算正确性的基础上, 还揭示了目前实验上没有发现的一类能量简并三点. 本工作的模拟结果可以对更进一步理解 STQD 的量子输运性质和为实验上寻找 STQD 合适的量子计算工作区提供参考.

2 常相互作用模型

2.1 理论模型

常相互作用 (constant interaction, CI) 模型是以半经典的方式描述量子点输运的基本模型 [23]. 常相互作用模型基于以下两个基本假设:

1) 不同量子点中被限制电子之间的库仑相互作用, 以及任一量子点中被限制电子与周围环境 (包括源极、漏极和栅极) 之间的库仑相互作用都可以分别用一个为常数的电容 C 来描述;

2) 任一量子点中被限制电子所能占据的量子化能谱不受外电势和量子点内填充电子数目的影响, 整个量子点系统的能量可以用经典的静电能和

电子占据的量子化能之和描述.

基于以上两条假设, 可以构建电容网络 (capacitive network) 描述量子点之间以及量子点与源极、漏极、栅极之间的相互关系, 如图 1 所示. 这里, 源极、漏极、栅极以及量子点均视为均匀体系, 可以抽象为节点 (nodes), 节点之间由线段相连, 表明它们之间存在相互作用, 以一个常电容 C 来描述.

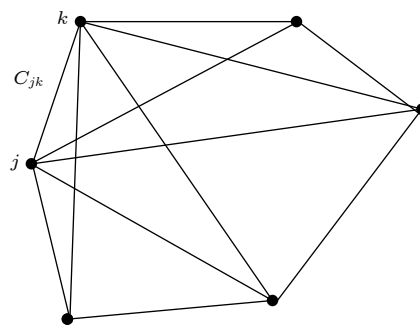


图 1 电容网络

Fig. 1. Capacitive network.

对图中的各个元素赋予相关的物理量:

1) 对每一个节点编号, 例如节点 j , 具有一定的电荷 Q_j 和相对于大地的电势 V_j (大地电势取零);

2) 任意两个节点之间, 例如节点 j 与节点 k 之间, 都具有耦合电容 C_{jk} (由对称性可知 $C_{jk} = C_{kj}$). 假设共有 N 个节点, 则节点 j 上的电荷 Q_j 可以写为

$$Q_j = Q_{j0} + \sum_{k=1, k \neq j}^N q_{jk} = Q_{j0} + \sum_{k=1, k \neq j}^N C_{jk}(V_j - V_k), \quad (1)$$

其中, Q_{j0} 为当节点 j 与其他所有节点之间都没有电势差时所具有的电荷; q_{jk} 为由于第 k 个节点与第 j 个节点存在电势差, 从而第 k 个节点在第 j 个节点上由于电容耦合而感生的电荷; C_{jk} 为第 j 个节点与第 k 个节点之间的耦合电容.

Q_{j0} 为当节点 j 与其他所有节点之间都没有电势差时所具有的电荷.

q_{jk} 为由于第 k 个节点与第 j 个节点存在电势差, 从而第 k 个节点在第 j 个节点上由于电容耦合而感生的电荷.

进一步定义:

$$Q_j^* \equiv Q_j - Q_{j0}. \quad (2)$$

为节点 j 的净电荷 (net charge), 则 (1) 式可以

重写为

$$Q_j^* = V_j C_j^\Sigma - \sum_{k=1, k \neq j}^N C_{jk} V_k, \quad (3)$$

其中

$$C_j^\Sigma \equiv \sum_{k=1, j \neq k}^N C_{jk}. \quad (4)$$

定义为 j 节点的自身电容, 即节点 j 与外部世界的所有耦合电容之和.

考虑到所有节点的表达方便, 可以将 (3) 式写为矩阵形式:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{C}\mathbf{V}, \quad (5)$$

其中

$\mathbf{Q} = (Q_1^*, Q_2^*, \dots, Q_j^*, \dots, Q_N^*)^T$ 为所有节点上净电荷的向量, 上标 T 表示向量的转置.

$\mathbf{V} = (V_1, V_2, \dots, V_j, \dots, V_N)^T$ 为所有节点电势的向量.

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_1^\Sigma & -C_{12} & \cdots & -C_{1i} & \cdots & -C_{1N} \\ -C_{21} & C_2^\Sigma & \cdots & -C_{2i} & \cdots & -C_{2N} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -C_{i1} & -C_{i2} & \cdots & C_i^\Sigma & \cdots & -C_{iN} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ -C_{N1} & -C_{N2} & \cdots & -C_{Ni} & \cdots & C_N^\Sigma \end{pmatrix}_{N \times N}$$

为所有节点之间的耦合电容矩阵.

进一步把节点分为两类:

1) 电荷节点 (charge nodes): 即量子点. 量子点用大写英文字母 $A, B, C \dots$ 来表示. 实际上量子点之间不仅有电容耦合, 还应当有电阻, 以描述电子在量子点之间的输运, 电阻的大小与隧穿势垒等物理参数有关 [24,25];

2) 电压节点 (voltage nodes): 即栅极、源极、漏极. 用希腊字母 $\alpha, \beta, \gamma \dots$ 来表示栅极, 用 S 来表示源极, 用 D 来表示漏极. 实际上, 源极和漏极与量子点之间的耦合不仅有电容耦合, 还应当有电阻, 以描述电子从源漏极进出量子点的过程, 电阻的大小与隧穿势垒等物理参数有关. 而栅极与量子点之间视为理想绝缘, 只存在电容耦合.

这样, 把 (5) 式化为分块矩阵方程的形式:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{C}\mathbf{V} \Rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_D \\ \mathbf{Q}_V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{DD} & \mathbf{C}_{DV} \\ \mathbf{C}_{DV} & \mathbf{C}_{VV} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_D \\ \mathbf{V}_V \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中, $\mathbf{Q}_D = (Q_A^*, Q_B^*, \dots, Q_X^*)^T = -e(\mathbf{N}_D - \mathbf{N}_0) = -e[(N_A, N_B, \dots, N_X)^T - (N_{A0}, N_{B0}, \dots, N_{X0})^T]$ 为电荷节点对应的电荷向量, $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ 为元电荷量; Q_X^* 为第 X 个量子点所携带的净电荷; N_X 为第 X 个量子点所具有的所有电子个数, $\mathbf{N}_D$ 为 N_X 所构成的列向量; N_{X0} 为在第 X 个量子点与其他所有节点都没有电势差时所具有的电子个数, 对应的电荷量一般称为背景电荷 [23,25], $\mathbf{N}_0$ 为 N_{X0} 所构成的列向量.

$\mathbf{Q}_V = (Q_S^*, Q_\alpha^*, Q_\beta^*, \dots, Q_\zeta^*, Q_D^*)^T$ 为电压节点对应的电荷向量.

$$\mathbf{C}_{DD} = \begin{pmatrix} C_A^\Sigma & -C_{AB} & -C_{AC} & \cdots & -C_{AZ} \\ -C_{AB} & C_B^\Sigma & -C_{BC} & \cdots & -C_{BZ} \\ -C_{AC} & -C_{BC} & C_C^\Sigma & \cdots & -C_{CZ} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ -C_{AZ} & -C_{BZ} & -C_{CZ} & \cdots & C_Z^\Sigma \end{pmatrix}$$

仅包含了电荷节点之间的电容.

$$\mathbf{C}_{DV} = \begin{pmatrix} -C_{AS} & -C_{A\alpha} & -C_{A\beta} & -C_{A\gamma} & \cdots & -C_{AD} \\ -C_{BS} & -C_{B\alpha} & -C_{B\beta} & -C_{B\gamma} & \cdots & -C_{BD} \\ -C_{CS} & -C_{C\alpha} & -C_{C\beta} & -C_{C\gamma} & \cdots & -C_{CD} \\ -C_{DS} & -C_{D\alpha} & -C_{D\beta} & -C_{D\gamma} & \cdots & -C_{DD} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ -C_{ZS} & -C_{Z\alpha} & -C_{Z\beta} & -C_{Z\gamma} & \cdots & -C_{ZD} \end{pmatrix}$$

仅包含了电荷节点和电压节点之间的电容.

$\mathbf{C}_{VV} = 0$. 在实际实验中, 源漏电极以及栅电极都与各自的恒压源相连, 故不考虑电压节点之间的相互影响.

$\mathbf{V}_D = (V_A, V_B, \dots, V_Z)^T$ 为电荷节点相对于大地的电势向量.

$\mathbf{V}_V = (V_S, V_\alpha, V_\beta, \dots, V_\zeta, V_D)^T$ 为电压节点相对于大地的电势向量, 这里仅考虑低源漏偏压情形, 向量中 $V_D = 0, V_D < V_S \approx 0$. 对于载流子的输运行为, 可以认为电子从源极输运到漏极, 空穴从漏极输运到源极.

接下来, 计算电荷节点的电势能 U , 它需要考虑量子点之间的互能和量子点本身的自能, 即 [26]:

$$U = \frac{1}{2} \mathbf{V}_D^T \mathbf{C}_{DD} \mathbf{V}_D, \quad (7)$$

其中 $\mathbf{V}_D$ 为电荷节点相对于大地的电势向量; $\mathbf{C}_{DD}$ 为电荷节点之间的耦合电容矩阵.

量子点的电势 $\mathbf{V}_D$ 并不是一个可观测量, 所以

不是我们关注的量, 我们关注的是可观测和可控的栅电压和源漏电压大小 (V_V) 如何影响量子点中的电子数目 (Q_D), 故由 (6) 式定义有效电荷 Q_D^{eff} :

$$Q_D^{\text{eff}} = (Q_A^{\text{eff}}, Q_B^{\text{eff}}, \dots) \equiv C_{DD} V_D = Q_D - C_{DV} V_V. \quad (8)$$

这样, 就可以用 Q_D^{eff} 来代替 (7) 式中的 V_D 如下:

$$U = \frac{1}{2} V_D^T C_{DD} V_D = \frac{1}{2} V_D^T Q_D^{\text{eff}} = \frac{1}{2} (C_{DD}^{-1} Q_D^{\text{eff}})^T Q_D^{\text{eff}}. \quad (9)$$

其中 $Q_D^{\text{eff}} = Q_D - C_{DV} V_V$ 包含了栅电压等可观测测量.

根据假设 (2), 量子点体系的总能量 $U(N_D)$ 还应当包括量子点中的量子化能级, 在仅考虑所有量子点处于基态的情况下:

$$U(N_D) = \frac{1}{2} (C_{DD}^{-1} Q_D^{\text{eff}})^T Q_D^{\text{eff}} + \sum_X \sum_{n=N_{X0}+1}^{N_X} E_{Xn}, \quad (10)$$

其中 E_{Xn} 为第 X 个量子点中的第 n 级量子化能大小. 我们人为规定 E_{Xn} 上仅能占据一个电子, 如果考虑了简并 (例如自旋简并或者谷简并), 那么这里相邻两个 E_{Xn} 的大小有可能是相同的.

这样, 量子点 X 的电化学势就定义为

$$\begin{aligned} \mu_X(N_A, N_B, \dots, N_X - 1 \leftrightarrow N_X, \dots) \\ \equiv U_b(N_A, N_B, \dots, N_X, \dots) - \\ U_b(N_A, N_B, \dots, N_X - 1, \dots). \end{aligned} \quad (11)$$

$\mu_X(N_A, N_B, \dots, N_X - 1 \leftrightarrow N_X, \dots)$ 的物理含

义即为在其他量子点中电子数目不变时, 第 X 个量子点增加一个电子所需要的能量.

至此, 结合 (8) 式—(11) 式, 导出了量子点总能量和不同量子点电化学势与可观测测量 (例如栅电压) 之间的关系. 具体的电容参数可以通过实验获得或者估算, 例如可以通过调节栅电压将三量子点转化成双量子点和单量子点来获取电容参数^[22]; 量子化能级的大小与具体材料和量子点大小等因素有关, 例如在直径约为 30 nm 的 InAs 纳米线上, 由两个宽度为 30 nm, 相距 70 nm 的指栅定义的量子点, 量子化能级差约为 1.5 meV^[27]; 背景电荷的大小则与器件中的施主浓度有关^[23,28], 可以近似认为是一个常数^[23]. 接下来, 利用常相互作用模型来具体讨论 STQD.

2.2 STQD 的电化学势

STQD 的等效电路和电容网络如图 2 所示, 从而可以对前面讨论过的物理量得到以下具体表达形式,

1) 电荷节点对应的电荷向量:

$$Q_D = (Q_A^*, Q_B^*, Q_C^*)^T = -e(N_D - N_0) = -e(N_A - N_{A0}, N_B - N_{B0}, N_C - N_{C0})^T. \quad (12)$$

2) 电荷节点之间的电容矩阵:

$$C_{DD} = \begin{pmatrix} C_A^\Sigma & -C_{AB} & -C_{AC} \\ -C_{AB} & C_B^\Sigma & -C_{BC} \\ -C_{AC} & -C_{BC} & C_C^\Sigma \end{pmatrix}. \quad (13)$$

为了方便使用 (10) 式计算电势能, 对 (13) 式取逆:

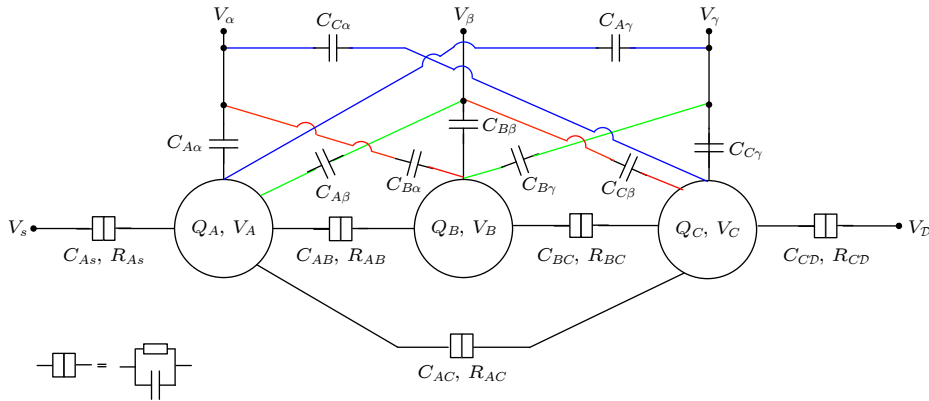


图 2 STQD 的等效电路

Fig. 2. Equivalent circuits of STQD.

$$C_{DD}^{-1} = K \begin{pmatrix} C_B^\Sigma C_C^\Sigma - C_{BC}^2 & C_{AC} C_{BC} + C_{AB} C_C^\Sigma & C_{AB} C_{BC} + C_{AC} C_B^\Sigma \\ C_{AC} C_{BC} + C_{AB} C_C^\Sigma & C_A^\Sigma C_C^\Sigma - C_{AC}^2 & C_{AB} C_{AC} + C_{BC} C_A^\Sigma \\ C_{AB} C_{BC} + C_B^\Sigma C_{AC} & C_{AB} C_{AC} + C_A^\Sigma C_{BC} & C_A^\Sigma C_B^\Sigma - C_{AB}^2 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

其中 $K = 1/(C_A^\Sigma C_B^\Sigma C_C^\Sigma - C_A^\Sigma C_{BC}^2 - C_C^\Sigma C_{AB}^2 - C_B^\Sigma C_{AC}^2 - 2C_{AB} C_{AC} C_{BC})$.

3) 电荷节点和电压节点之间的电容矩阵:

$$C_{DV} = \begin{pmatrix} -C_{AS} & -C_{A\alpha} & -C_{A\beta} & -C_{A\gamma} & -C_{AD} \\ -C_{BS} & -C_{B\alpha} & -C_{B\beta} & -C_{B\gamma} & -C_{BD} \\ -C_{CS} & -C_{C\alpha} & -C_{C\beta} & -C_{C\gamma} & -C_{CD} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

5) 电荷节点相对于大地的电势向量:

$$V_D = (V_A, V_B, V_C)^T. \quad (16)$$

6) 电压节点相对于大地的电势向量:

$$V_V = (V_S, V_\alpha, V_\beta, V_\gamma, V_D)^T. \quad (17)$$

在线性输运的条件下, 考虑到 $V_D = 0, V_D < V_S \approx 0$, 由 (8) 式可以得到.

7) 有效电荷向量:

$$Q_D^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} -e(N_A - N_{A0}) + C_{A\alpha} V_\alpha + C_{A\beta} V_\beta + C_{A\gamma} V_\gamma \\ -e(N_B - N_{B0}) + C_{B\alpha} V_\alpha + C_{B\beta} V_\beta + C_{B\gamma} V_\gamma \\ -e(N_C - N_{C0}) + C_{C\alpha} V_\alpha + C_{C\beta} V_\beta + C_{C\gamma} V_\gamma \end{pmatrix}. \quad (18)$$

综上, 利用 (10) 式可以计算 STQD 系统的总能量如下:

$$\begin{aligned} U_b(N_A, N_B, N_C) &= \frac{1}{2e^2} Q_A^{\text{eff}} (E_A Q_A^{\text{eff}} + E_{AB} Q_B^{\text{eff}} + E_{AC} Q_C^{\text{eff}}) + \frac{1}{2e^2} Q_B^{\text{eff}} (E_{AB} Q_A^{\text{eff}} + E_B Q_B^{\text{eff}} + E_{BC} Q_C^{\text{eff}}) \\ &+ \frac{1}{2e^2} Q_C^{\text{eff}} (E_{AC} Q_A^{\text{eff}} + E_{BC} Q_B^{\text{eff}} + E_C Q_C^{\text{eff}}) + \sum_{n=N_{A0}+1}^{N_A} E_{An} + \sum_{n=N_{B0}+1}^{N_B} E_{Bn} + \sum_{n=N_{C0}+1}^{N_C} E_{Cn}, \end{aligned} \quad (19)$$

其中

$$E_X \equiv \frac{e^2}{C_X^\Sigma} \frac{1}{1 - \frac{C_Z^\Sigma C_{XY}^\Sigma + C_Y^\Sigma C_{XZ}^\Sigma + 2C_{XY} C_{XZ} C_{YZ}}{(C_Y^\Sigma C_Z^\Sigma - C_{YZ}^2) C_X^\Sigma}}, \quad (20)$$

$$E_{XY} \equiv \frac{e^2}{C_{XY}} \frac{1}{\frac{C_X^\Sigma C_Y^\Sigma C_Z^\Sigma - C_X^\Sigma C_{YZ}^2 - C_Y^\Sigma C_{XZ}^2 - C_{XY} C_{XZ} C_{YZ}}{C_{XY} (C_{XZ} C_{YZ} + C_{XY} C_Z^\Sigma)} - 1}. \quad (21)$$

分别被称为量子点 X 的单电子充电能和量子点 X 与量子点 Y 的相互作用能^[20], 以上的 X, Y, Z 指代了量子点 A, B, C . 以 A 量子点为例, 量子点 A 的电化学势可以利用 (11) 式定义为

$$\begin{aligned} \mu_A(N_A - 1 \leftrightarrow N_A, N_B, N_C) &\equiv U_b(N_A, N_B, N_C) - U_b(N_A - 1, N_B, N_C) \\ &= -\frac{Q_A^{\text{eff}} E_A}{e} - \frac{Q_B^{\text{eff}} E_{AB}}{e} - \frac{Q_C^{\text{eff}} E_{AC}}{e} - \frac{E_A}{2} + E_{N_A}, \end{aligned} \quad (22)$$

其中 $Q_A^{\text{eff}}, Q_B^{\text{eff}}, Q_C^{\text{eff}}$ 由 (18) 式决定.

同理, 量子点 B 和量子点 C 的电化学势分别为

$$\mu_B(N_A, N_B - 1 \leftrightarrow N_B, N_C) = -\frac{Q_B^{\text{eff}} E_B}{e} - \frac{Q_A^{\text{eff}} E_{AB}}{e} - \frac{Q_C^{\text{eff}} E_{BC}}{e} - \frac{E_B}{2} + E_{N_B}, \quad (23)$$

$$\mu_C(N_A, N_B, N_C - 1 \leftrightarrow N_C) = -\frac{Q_C^{\text{eff}} E_C}{e} - \frac{Q_A^{\text{eff}} E_{AC}}{e} - \frac{Q_B^{\text{eff}} E_{BC}}{e} - \frac{E_C}{2} + E_{N_C}. \quad (24)$$

在 STQD 中, 我们认为 $E_{AC} < E_{AB}, E_{BC}$. 利用 (22) 式—(24) 式, 就可以得到三个量子点的电化学势在栅电压调制下的变化情况.

3 模拟结果讨论

3.1 STQD 线性输运二维稳态图

对于 STQD 系统, 在量子限域情况和线性输运前提一定的条件下, 只有三个可调控栅电压, 即 V_α , V_β 和 V_γ . 实验上采用扫描一个栅电压, 同时保持另两个栅电压静态不变, 然后再顺序改变两个静态栅电压的值, 重复第一个栅电压的扫描, 这样得到 STQD 三维电荷稳态图在一定栅电压范围内的全貌, 对应着极大的数据量. 实际实验中往往设定其中一个栅电压不变, 扫描其他两个栅电压来减少数据量, 这样得到的是三维电荷稳态图的一个二维切面, 即三量子点的二维稳态图. 在本文的模拟中, 参考实验的具体情况^[18–20], 设置中间栅电压 V_β 为一个常数, 以 V_α 为纵轴, V_γ 为横轴, 借助计算机寻找以下三种情况来绘制 STQD 在能量简并点附近的二维稳态图^[20]:

1) 某一个量子点特定的电势与源漏费米能级对齐. 它代表了电子可以直接由源极隧穿到达该量子点, 这个隧穿过程包括直接的顺序隧穿和间接的共隧穿^[25]. 如果这个电子在量子点中停留一定时间后进一步隧穿抵达了漏极, 且以上过程持续重复进行, 则形成可观测的隧穿电流, 这个隧穿电流在二维稳态图中描绘出了该量子点的充电线 (charging line)^[20,25].

2) 不同量子点特定的电势相互对齐, 它代表了电子可以在这几个量子点之间实现单电子隧穿, 这个过程由于没有电子由源极输运到漏极, 故不会产生可观测的隧穿电流, 在一般的隧穿电流描绘的二维稳态图中并不可见. 但通过电荷传感器 (charge sensor) 可以观测到该过程产生的单电子电荷再分布^[29–31]. 这个过程产生的可观测量在二维稳态图中对应了量子点之间的电荷重分布线 (charge reconfiguration line)^[20,25].

3) 同时满足条件 (1) 和条件 (2), 这种情况在二维稳态图中一般对应了某些特定的点, 它们往往是某几个能量简并点.

用 (N_A, N_B, N_C) 来表示量子点 A 具有 N_A 个电子, 量子点 B 具有 N_B 个电子, 量子点 C 具有 N_C 个电子 (N_A, N_B, N_C 均为正整数). 在低能单电子隧穿的条件下, 我们只需研究 (N_A, N_B, N_C) , $(N_A +$

$1, N_B, N_C)$, $(N_A, N_B + 1, N_C)$, $(N_A, N_B, N_C + 1)$, $(N_A + 1, N_B + 1, N_C)$, $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$, $(N_A, N_B + 1, N_C + 1)$, $(N_A + 1, N_B + 1, N_C + 1)$ 这八个状态之间的相互转化情况, 就可以描述整个 STQD 的二维稳态图.

如图 3 所示为严格对称 STQD (A 量子点的电容参数与 C 量子点的电容参数相同) 的二维稳态图. 我们参考前期的实验工作选择了具体的电容参数^[22], 见附表 A1. 不失一般性, 我们取量子化能级 E_{Xn} 为定值 0 meV, 背景电荷对应的电子个数 N_{X0} 为定值 0. 数值模拟中设定温度为绝对零度, 不考虑能级展宽, 也不考虑只有在能量简并点附近才重要的隧穿耦合效应^[25]. 需要指出的是, 图所示的模拟二维稳态图是大部分实验工作中任意选择一个静态栅电压时具有代表性的测量结果^[20], 以不同颜色的区域分割线表示不同的物理过程, 可以分为以下三组:

1) 红色线、蓝色线和黑色线为一组, 它们分别对应了量子点 A 、 B 和 C 的充电线.

2) 黄色线、紫色线和绿色线为一组, 它们分别对应了电子在量子点 A 和 B 、量子点 B 和 C 以及量子点 A 和 C 之间的电荷重分布线.

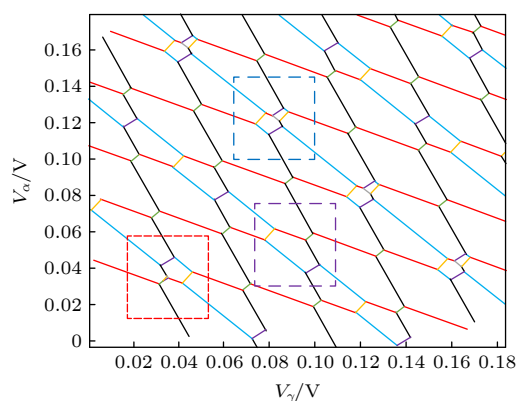


图 3 在中间量子点栅压 $V_\beta = 0.0106$ V 时的 STQD 的二维稳态图. 其中红色线、蓝色线和黑色线分别代表了量子点 A 、 B 、 C 的充电线; 黄色线、紫色线以及绿色线分别代表了电荷在量子点 A 和 B 、量子点 B 和 C 以及量子点 A 和 C 之间的电荷重分布线; 灰色线代表了 STQD 点独有的输运过程

Fig. 3. Low source-drain bias charge stability diagram of STQD at $V_\beta = 0.0106$ V. Red-, blue- and black-colored lines represent the charging line of quantum dot A , B and C , respectively; Yellow-, purple- and green-colored lines represent charge reconfiguration lines between quantum dots A and B , B and C , and A and C , respectively; Gray-colored line represents a unique transport process of STQD.

以上两组线中有一个量子点处于库伦阻塞状态, 所以三量子点在形式上等效为双量子点, 相应的电荷稳态图类似双量子点的情形, 也在双量子点的实验电荷稳态图中能找到对应的情况^[25].

3) 灰色线代表了由于某个电子进入 (或退出) 量子点 A 或 C , 导致 STQD 中电子的再分布, 即对应了 $(N_A, N_B + 1, N_C)$ 态与 $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$ 态之间的能量简并状态, 可以认为是来自源极的电子进入 A 量子点, 同时把 B 量子点中的电子“挤到” C 量子点中^[16]. 这是 STQD 相对于双量子点独有的输运过程.

3.2 电荷占据能量简并三重态点: 三点

三点 (triple point) 是指二维稳态图中三个不同电荷占据态简并的一个点^[25]. 在 STQD 系统的模拟二维稳态图中, 可以将三点归纳为以下三类:

第一类三点如图 3 紫色虚线方框所示区域, 将该区域放大如图 4(a) 所示, 图中 I 区指代了电荷占据态 $(N_A, N_B + 1, N_C)$, 不同颜色的箭头标识了这类三点的三种表现形式, 即绿色箭头表示 A 和 C 两个量子点电化学势对齐, 紫色箭头表示 B 和 C 两个量子点电化学势对齐, 黄色箭头表示 A 和 B 两个量子点电化学势对齐. 其中实心点标示了在该简并点处是电子型输运. 以图 4(a) 中的绿色实心点

为例, 电化学势对齐情况如图 4(b) 所示, 它代表了 $(N_A, N_B + 1, N_C), (N_A + 1, N_B + 1, N_C), (N_A, N_B + 1, N_C + 1)$ 三个状态的简并, 可以对应 $(N_A, N_B + 1, N_C) \rightarrow (N_A + 1, N_B + 1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C + 1) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C)$ 的电子输运过程, 此时电子可以首先由源极共振隧穿至 A 量子点, 接着借助共隧穿通过 B 量子点到达 C 量子点, 最后共振隧穿至漏极; 空心点标示了在该简并点处是空穴型输运. 以图 4(a) 中的绿色空心点为例, 电化学势对齐情况如图 4(c) 所示, 它代表了 $(N_A + 1, N_B + 1, N_C + 1), (N_A + 1, N_B + 1, N_C), (N_A, N_B + 1, N_C + 1)$ 三个状态的简并, 可以对应 $(N_A + 1, N_B + 1, N_C + 1) \rightarrow (N_A + 1, N_B + 1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C + 1) \rightarrow (N_A + 1, N_B + 1, N_C + 1)$ 的空穴输运过程, 此时空穴可以由漏极共振隧穿至 C 量子点, 接着借助共隧穿通过 B 量子点到达 A 量子点, 最后共振隧穿至源极. 由此可见, 空穴的输运过程是与电子的输运过程互补的. 这一类三点的优点是: 总有一个量子点处于库伦阻塞状态. 这类三点可以在实验中找到对应的情况^[18].

第二类三点如图 3 蓝色虚线方框所示区域, 将该区域放大如图 5(a) 所示, 图中 I 区指代了电荷占据态 $(N_A, N_B + 1, N_C)$, II 区指代了电荷占据态 $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$, 空心点标示了在该简并点处

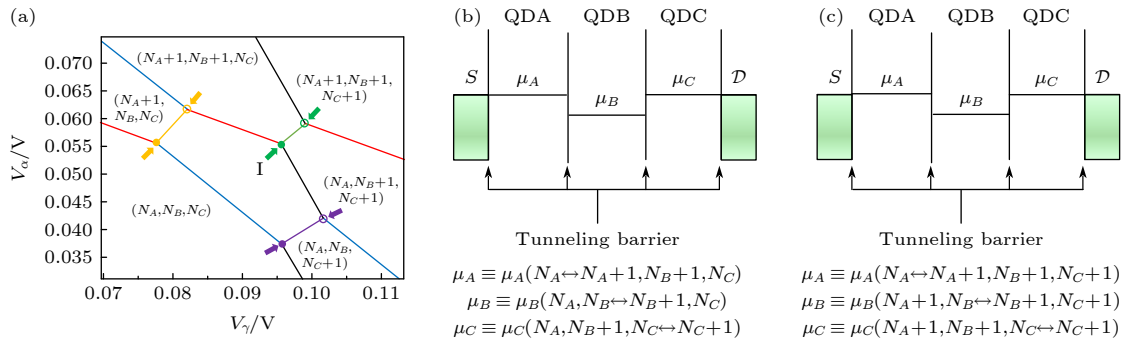


图 4 第一类三点. 其中 I 区指代的是 $(N_A, N_B + 1, N_C)$ 区域 (a) 对应了图 3 中的紫色虚线方框, 这里 $V_\beta = 0.0106V$. 绿色箭头表示 A 和 C 两个量子点电化学势对齐, 紫色箭头表示 B 和 C 两个量子点电化学势对齐, 黄色箭头表示 A 和 B 两个量子点电化学势对齐, 实心点对应了电子型输运, 空心点对应了空穴型输运; (b) 图 (a) 中绿色实心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C ; (c) 图 (a) 中绿色空心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C

Fig. 4. The first type of triple points. Region I refers to $(N_A, N_B + 1, N_C)$ charge state: (a) Zoom-in of the purple box in Fig. 3 at $V_\beta = 0.0106V$. The green-colored arrow indicates the alignment between electrochemical potential of dot A and dot C . The purple-colored arrow indicates the alignment between electrochemical potential of dot B and dot C . The yellow-colored arrow indicates the alignment between electrochemical potential of dot A and dot B . Solid dots correspond to electron transport, and open dots correspond to hole transport; (b) the alignment of electrochemical potential of green-colored solid dot in Figure (a). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C , respectively; (c) the alignment of electrochemical potential of green-colored open dot in Figure (a). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C , respectively.

是空穴型输运. 以图 5(a) 中的蓝色空心点为例, 电化学势对齐情况如图 5(c) 所示, 它代表了 (N_A+1, N_B, N_C+1) , (N_A+1, N_B+1, N_C) , (N_A, N_B+1, N_C) 三个状态的简并, 可以对应 $(N_A+1, N_B, N_C+1) \rightarrow (N_A+1, N_B+1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B+1, N_C) \rightarrow (N_A+1, N_B, N_C+1)$ 的空穴输运过程, 此时有一个额外的空穴可以处于 B 量子点中, 也可处于 C 量子点中, 当该空穴处于 C 量子点时, 来自漏极的空穴可以借助共隧穿输运至 A 量子点; 需要指出的是在图 5(a) 中并不存在以上空穴型输运对应的电子型输运的第二类三点. 为了显示对应的电子型输运第二类三点, 需要在图 5(a) 的基础上减小 V_β 得到如图 5(b) 所示的二维稳态图, 实心点标示了在该简并点处是电子型输运. 以图 5(b) 中的蓝色实心点为例, 电化

学势对齐情况如图 5(d) 所示, 输运过程与空穴情况互补. 这类三点的特点是: 中间量子点的填充情况会影响两端量子点的填充情况, 如果中间量子点填充了电荷, 那么两端两个量子点就不会填充电荷. 这类三点也可以在实验中找到对应的情况 [20].

第三类三点如图 3 红色虚线方框所示区域, 将该区域放大如图 6(a) 所示, 图中 I 区指代了电荷占据态 (N_A, N_B+1, N_C) , II 区指代了电荷占据态 (N_A+1, N_B, N_C+1) , 实心点标示了在该简并点处是电子型输运. 以图 6(a) 中的红色实心点为例, 电化学势对齐情况如图 6(c) 所示, 它代表了 (N_A+1, N_B, N_C) , (N_A, N_B+1, N_C) , (N_A, N_B, N_C+1) 三个电荷占据态的简并, 可以对应 $(N_A+1, N_B, N_C) \rightarrow (N_A, N_B+1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B, N_C+1) \rightarrow (N_A+1, N_B, N_C)$ 的电子型输运过程.

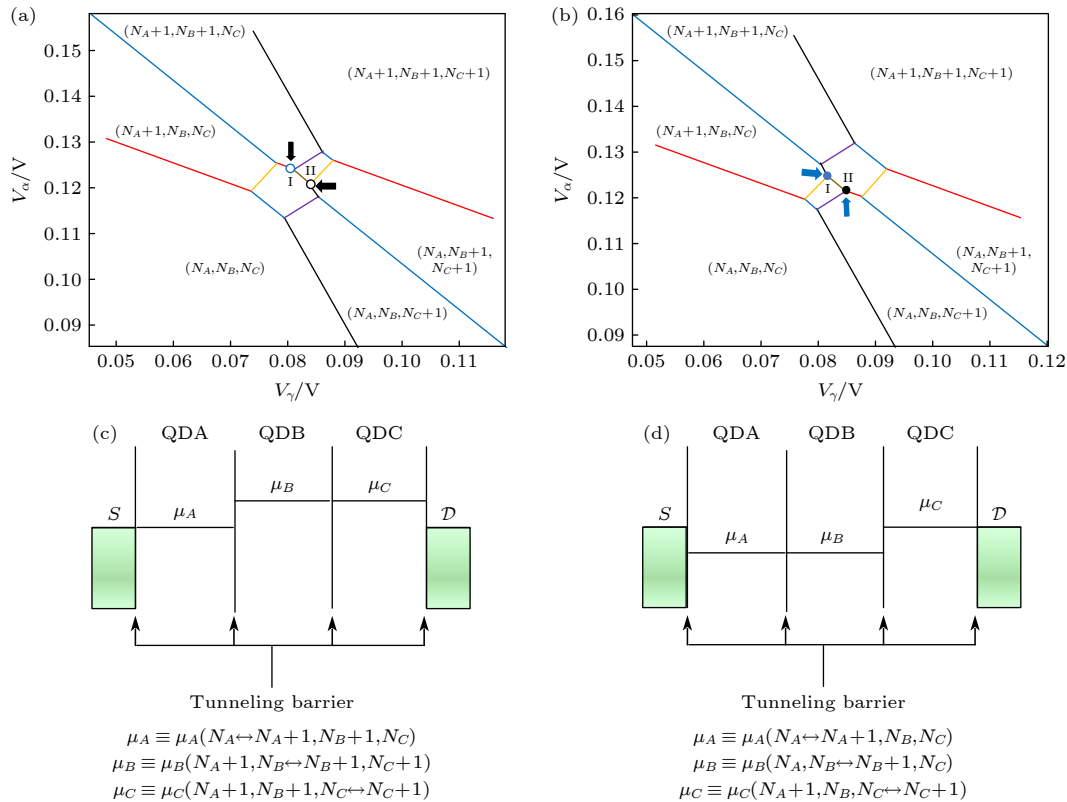


图 5 第二类三点, 其中 I 区指代的是 (N_A, N_B+1, N_C) 区域, II 区指代的是 (N_A+1, N_B, N_C+1) 区域 (a) 对应了图 3 中的蓝色虚线方框, 这里 $V_\beta = 0.0106$ V. 箭头指代的空心点标示了在该三点处是空穴型输运; (b) $V_\beta = 0.0078$ V. 箭头指代的实心点标示了在该三点处是电子型输运. 图 (b) 对应二维稳态图的 V_β 值小于图 (a) 的 V_β 值; (c) 图 (a) 蓝色空心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C; (d) 图 (b) 蓝色实心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C

Fig. 5. The second type of triple points. Region I refers to (N_A, N_B+1, N_C) charge state and region II refers to (N_A+1, N_B, N_C+1) charge state: (a) Zoom-in of the blue-colored box in Fig. 3 at $V_\beta = 0.0106$ V. The two arrows indicate triple points of hole transport; (b) at $V_\beta = 0.0078$ V. The two arrows indicate triple points of electron transport. V_β of (b) is smaller than that of Figure (a); (c) the alignment of electrochemical potential indicated by the blue-colored open dot in Figure (a). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively; (d) the alignment of electrochemical potential indicated by the blue-colored solid dot in Figure (b). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively.

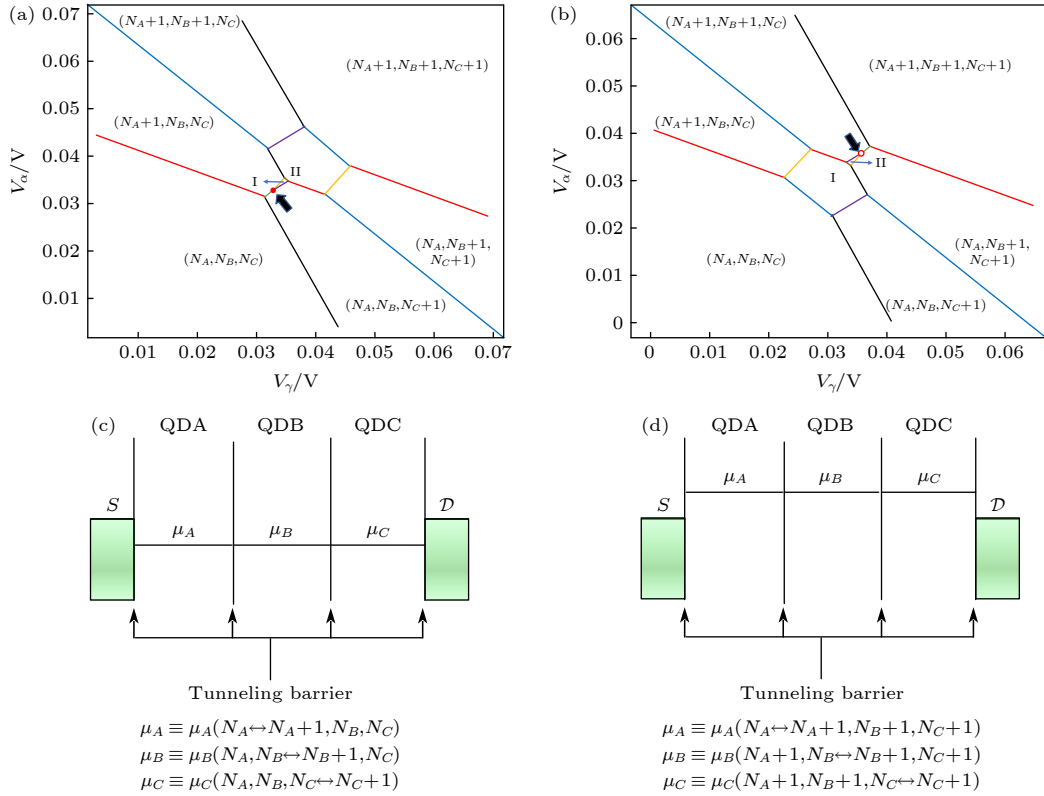


图 6 第三类三点, 其中 I 区指代的是 $(N_A, N_B + 1, N_C)$ 区域, II 区指代的是 $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$ 区域 (a) 对应了图 3 中的红色虚线方框, 这里 $V_\beta = 0.0106$ V. 箭头指代的实心点标示了在该三点处是电子型输运; (b) $V_\beta = 0.0167$ V. 箭头指代的空心点标示了在该三点处是空穴型输运. 图 (b) 对应二维稳态图的 V_β 值大于图 (a) 的 V_β 值; (c) 图 (a) 红色实心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C. (d) 图 (b) 红色空心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C

Fig. 6. The third type of triple points. Region I refers to $(N_A, N_B + 1, N_C)$ charge state and region II refers to $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$ charge state; (a) Zoom-in of the red-colored box in Fig. 3 at $V_\beta = 0.0106$ V. The arrow indicates a triple point of electron transport; (b) if $(N_A, N_B, N_C) = (1, 1, 1)$, then $V_\beta = 0.0167$ V. The arrow indicates a triple point of hole transport. V_β of Figure (b) is larger than that of Figure (a); (c) the alignment of electrochemical potential indicated by the red-colored solid dot in Figure (a). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively; (d) the alignment of electrochemical potential indicated by the red-colored open dot in Figure (b). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively.

N_C) 的电子型输运过程. 此时有一个额外的电子被三个量子点所共有. 为了显示对应的空穴型第三类三点, 在图 6(a) 的基础上增大 V_β 可以得到如图 6(b) 所示的二维稳态图, 空心点标示了在该简并点处是空穴型输运. 以图 6(b) 中的红色空心点为例, 电化学势对齐情况如图 6(d) 所示, 输运过程与电子情况互补. 这类三点的特点是有一个电荷被三个量子点所共有. 但可能由于分辨率不高等原因, 这类三点目前并没有在实验中被找到.

3.3 电荷占据能量简并四重态点: 四点

四点 (quadruple point) 是指二维稳态图中四个电荷占据态简并的一个点 [17,20]. 在如图所示的 STQD 二维稳态图中并不显见, 这是由于四点的形

成需要更苛刻的条件, 例如要求三个量子点的电化学势分别对齐的同时与源漏费米能级也对齐, 在实际实验中很难通过简单的、未经设计的栅电压设置达到, 往往需要对量子点的精密电学调控才能观察到. 而借助数值模拟计算, 可以灵活调节 V_β 值, 进而系统地讨论 STQD 稳态图中的四点性质. 结合实验中的具体情况, 将模拟得到的四点归纳为以下三类:

第一类四点如图 7(a) 和图 7(b) 两个图中的箭头所示, 图中 I 区指代了电荷占据态 $(N_A, N_B + 1, N_C)$, II 区指代了电荷占据态 $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$, 图 7(b) 的 V_β 值略大于图 (a) 的 V_β 值. 图 7(a) 中的棕色实心点标示了在该四点处是电子型输运, 电化学势对齐情况如图 7(c) 所示, 它代表了 (N_A, N_B, N_C) ,

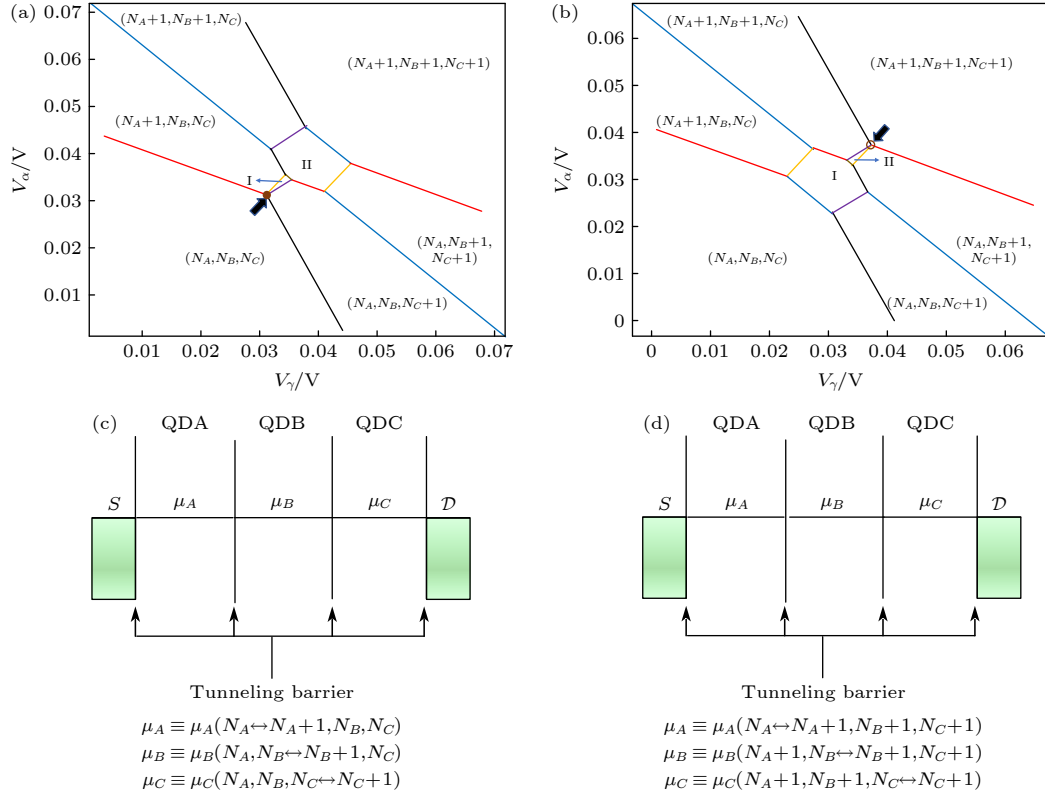


图 7 第一类四点, 其中 I 区指代的是 $(N_A, N_B + 1, N_C)$ 区域, II 区指代的是 $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$ 区域 (a) 在 $V_\beta = 0.0109$ V 下的二维稳态图. 箭头指代的实心点对应了电子运输的四点; (b) $V_\beta = 0.0166$ V. 箭头指代的空心点对应了空穴运输的四点. 图 (b) 对应二维稳态图的 V_β 值大于图 (a) 的 V_β 值; (c) 图 (a) 棕色实心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C; (d) 图 (b) 棕色空心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C

Fig. 7. The first type of quadruple points. Region I refers to $(N_A, N_B + 1, N_C)$ charge state and region II refers to $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$ charge state: (a) Charge stability diagram at $V_\beta = 0.0109$ V. The arrow indicates a quadruple point of electron transport; (b) at $V_\beta = 0.0166$ V. The arrow indicates a quadruple point of hole transport. V_β of Figure (b) is larger than that of Figure (a); (c) the alignment of electrochemical potential indicated by the brown-colored solid dot in Figure (a). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively; (d) the alignment of electrochemical potential indicated by the brown-colored open dot in Figure (b). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively.

$(N_A + 1, N_B, N_C)(N_A, N_B + 1, N_C)(N_A, N_B, N_C + 1)$ 四个电荷占据态的简并, 可以对应 $(N_A, N_B, N_C) \rightarrow (N_A + 1, N_B, N_C) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B, N_C + 1) \rightarrow (N_A, N_B, N_C)$ 的电子运输过程. 此时来自源极的电子可以分别占据 A, B, C 三个量子点或者三个量子点都不占据, 共四种情况. 图 7(b) 中的棕色空心点标示了在该四点处是空穴型运输, 电化学势对齐情况如图 7(d) 所示, 其运输过程与电子情况互补. 这类四点也可在实验中找到对应的情况 [17].

第二类四点如图 8 中的箭头所示, 图中 I 区指代了电荷占据态 $(N_A, N_B + 1, N_C)$, II 区指代了电荷占据态 $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$; 这类四点由两个分别为电子型和空穴型的第二类三点合并而成, 故

本身就可以代表电子运输和空穴运输两个过程. 以图 8(a) 中的橘黄色点为例, 电化学势对齐情况如图 8(b) 所示, 它代表了 $(N_A, N_B, N_C + 1), (N_A + 1, N_B, N_C + 1), (N_A, N_B + 1, N_C + 1), (N_A, N_B + 1, N_C)$ 四个电荷占据态的简并. 可以对应 $(N_A, N_B, N_C + 1) \rightarrow (N_A + 1, N_B, N_C + 1) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C + 1) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B, N_C + 1)$ 的电子运输过程, 运输情况是来自源极的电子可以进入量子点 A 或 B 或者都不进入, 如果该电子进入量子点 B, 那么 C 量子点中的电子就可以运输到漏极, 共四种情况. 也可以对应 $(N_A, N_B + 1, N_C + 1) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B, N_C + 1) \rightarrow (N_A + 1, N_B, N_C + 1) \rightarrow (N_A, N_B + 1, N_C + 1)$ 的空穴运输过程, 运输情况是来自漏极的空穴可以进入量子点 C 或 B 或者都不进入, 如果该空穴进入量子点 B, 那么 A 量

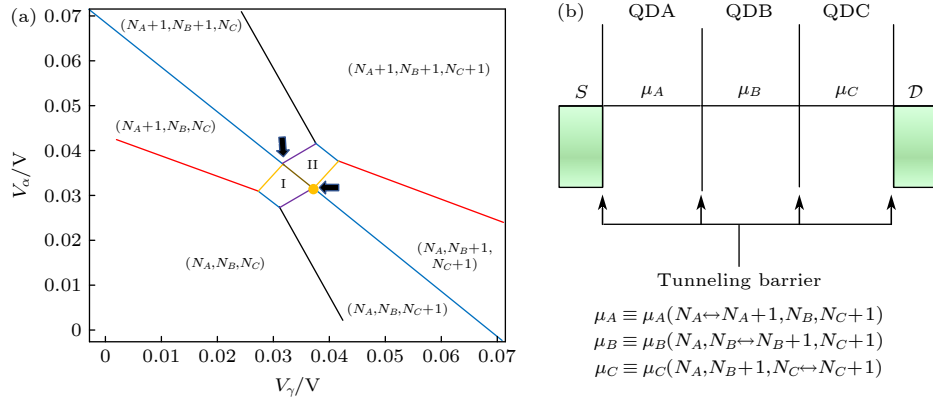


图 8 第二类四点 (a) 在 $V_\beta = 0.0138$ V 下的二维稳态图. I 区指代的是 (N_A, N_B+1, N_C) 区域, II 区指代的是 (N_A+1, N_B, N_C+1) 区域. 箭头对应了四点的位置; (b) 图 (a) 橘黄色点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C

Fig. 8. The second type of quadruple points: (a) Charge stability diagram at $V_\beta = 0.0138$ V. Region I refers to (N_A, N_B+1, N_C) charge state and region II refers to (N_A+1, N_B, N_C+1) charge state. The arrows indicate the position of quadruple points; (b) the alignment of electrochemical potential indicated by the orange-colored point in Figure (a). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively.

子点中的空穴就可以输运到源极. 这类四点也可以在实验中找到对应的情况^[20].

第三类四点如图 9(a) 和图 9(d) 中的箭头所示, 图中 I 区指代了电荷占据态 (N_A, N_B+1, N_C) , II 区指代了电荷占据态 (N_A+1, N_B, N_C+1) . 我们发现在附表 A1 所示的电容参数下, 第三类四点形成的同时, I 区和 II 区在二维稳态图中从一个区域变成了一个点, 如图 9(a), 图 9(b), 图 9(c) 与图 9(d) 所示. 图 9(a) 中灰色实心点标示了在该四点处是电子型输运, 电化学势对齐情况如图 9(e) 所示, 它代表了 (N_A+1, N_B, N_C) , (N_A, N_B+1, N_C) , (N_A, N_B, N_C+1) , (N_A+1, N_B, N_C+1) 四个电荷占据态的简并, 可以对应 $(N_A+1, N_B, N_C) \rightarrow (N_A, N_B+1, N_C) \rightarrow (N_A, N_B, N_C+1) \rightarrow (N_A+1, N_B, N_C+1) \rightarrow (N_A+1, N_B, N_C)$ 的电子输运过程. 灰色实心点的输运情况是首先一个电子可以在 A, B, C 三个量子点之间自由输运, 另外, 当该电子占据 C 量子点时, 来自源极的另一个电子可以进入 A 量子点中, 共四种情况. 图 9(d) 中的灰色空心点对应了空穴型输运, 电化学势对齐情况如图 9(f) 所示, 输运过程与电子情况互补. 这类四点也可以在实验中找到对应的情况^[17,32].

以上分类详细讨论了三点和四点的相关性质. 形式上, 以理论方式再现了三量子点输运中的三点和四点; 另一方面, 由于数值计算的便利性, 也可

以通过连续地调节 V_β 值很方便地再现三点到四点之间的转变过程, 这些便利性可以帮助我们在实际实验中设定高效的实验方案. STQD 二维稳态图的系统数值构建, 对于进一步利用 STQD 实现各种量子调控具有积极的指导意义.

例如, 可以将 STQD 调至图 4(a) 所示的工作区, 通过合理地调节 V_α 和 V_β , 可以改变电子之间的海森堡交换能, 实现 STQD 系统在 (N_A+1, N_B, N_C) (N_A, N_B+1, N_C) 以及 (N_A, N_B, N_C+1) 三个态之间的相互作用, 进而实现交换量子比特^[18]; 借助电子自旋共振 (ESR) 技术在图 4(a) 所示的工作区还可以实现电子自旋的快速调控^[33]. 除此之外, 借助图 4(a) 中绿色箭头所示的三点, 可以研究量子点 A 与量子点 C 之间的远距离传输问题^[22], 实现“远距离”电荷传输对于提高交换作用自旋量子比特运行效率^[14] 和实现电子自旋态的远距离传输有着非常重要的意义^[34,35]; 利用第三类三点或第一类四点, 可以灵活调节电子在量子点中的位置, 借此可以进一步利用 STQD 研究量子元胞自动机^[16]; 如果利用单电子自旋作为量子比特, 可以借助双量子点实现 CNOT 门的应用^[36], 进而利用第三类三点或第一类四点附近的工作区研究三量子比特 Toffoli 门^[37]. 总之, 对于能量简并点的深入理解可以为我们寻找 STQD 合适量子计算的工作区提供积极指导.

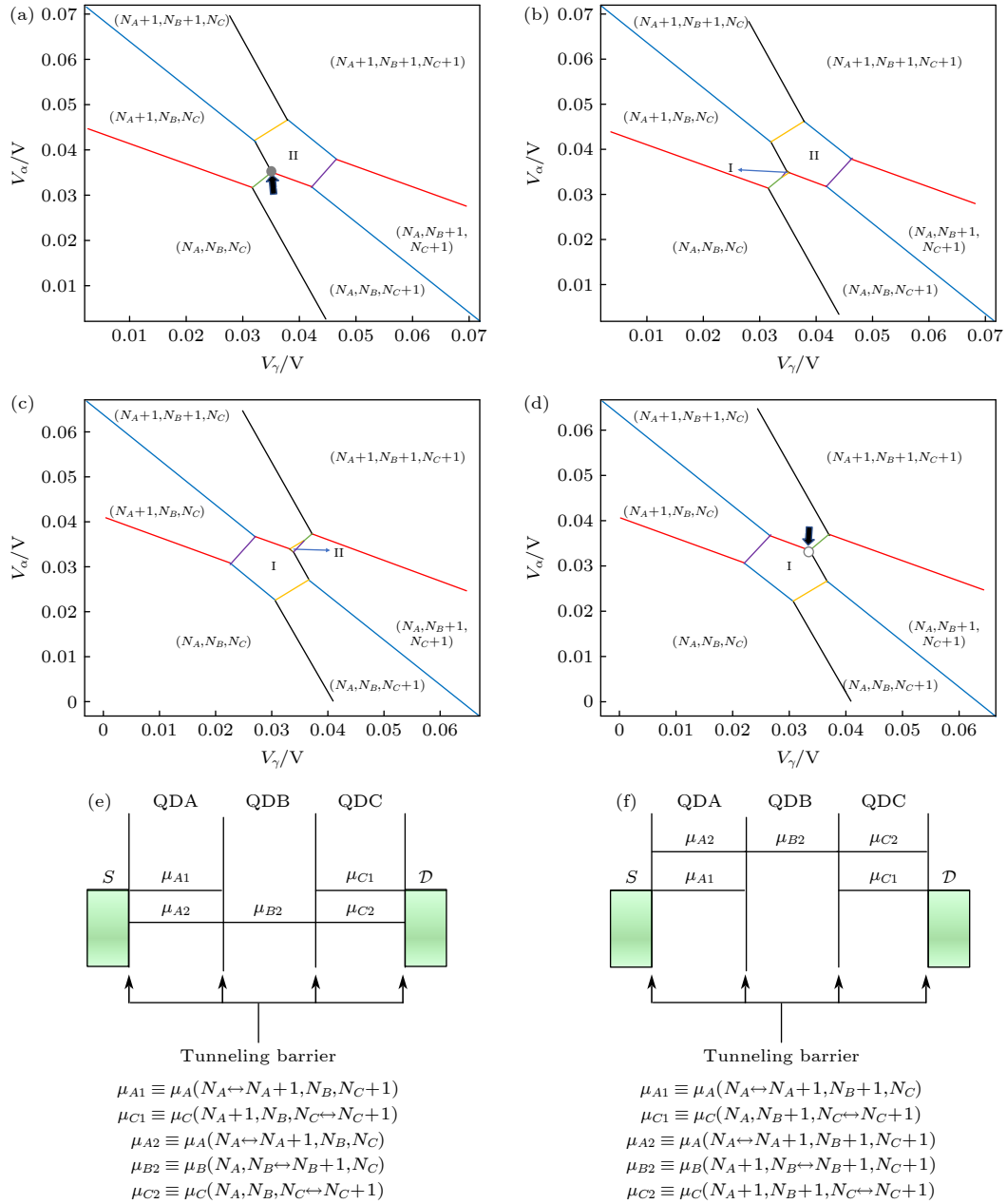


图 9 第三类四点, 其中 I 区指代的是 $(N_A, N_B + 1, N_C)$ 区域, II 区指代的是 $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$ 区域 (a) 这里 $V_\beta = 0.0102$ V. 箭头指代的四点对应了电子输运; (b) $V_\beta = 0.0104$ V. 图 (b) 对应二维稳态图的 V_β 值稍大于图 (a) 的 V_β 值; (c) $V_\beta = 0.0170$ V. 图 (c) 对应二维稳态图的 V_β 值稍小于图 (d) 的 V_β 值; (d) $V_\beta = 0.0172$ V. 箭头指代的四点对应了空穴输运; (e) 图 (a) 灰色实心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C; (f) 图 (d) 灰色空心点对应的电化学势对齐情况, QDA, QDB 和 QDC 分别指代的是量子点 A, B 和 C

Fig. 9. The third type of quadruple points. Region I refers to $(N_A, N_B + 1, N_C)$ charge state and region II refers to $(N_A + 1, N_B, N_C + 1)$ charge state: (a) Charge stability diagram at $V_\beta = 0.0102$ V. The arrow indicates a quadruple point of electron transport; (b) at $V_\beta = 0.0104$ V. V_β of Figure (b) is a little bit larger than that of Figure (a); (c) at $V_\beta = 0.0170$ V. V_β of Figure (c) is a little bit smaller than that of Figure (d); (d) at $V_\beta = 0.0172$ V. The arrow indicates a quadruple point of hole transport; (e) the alignment of electrochemical potential indicated by the gray-colored solid dot in Figure (a). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively; (e) the alignment of electrochemical potential indicated by the gray-colored open dot in Figure (d). QDA, QDB and QDC refer to quantum dot A, B and C, respectively.

4 结 论

本文运用常相互作用模型, 以一定的实验参数

为基础, 借助数值模拟计算得到了 STQD 的二维稳态图, 不仅可以很好地重现以往借助实验得到的 STQD 二维稳态图, 还可以借助理论计算模拟

保证高的清晰度以及灵活地调整各类参数,降低实验工作量,从而高效系统地讨论 STQD 稳态图的相关性质. 本文为研究理解 STQD 的输运过程、为利用 STQD 实现交换量子比特或者混合量子比特乃至进一步利用 STQD 更深入地研究量子输运现象、为量子计算和量子模拟提供了参考基础.

感谢北京理工大学仪器科学与技术专业曹非凡同学在程序编写方面的指导.

附录 A

表 1 STQD 二维稳态图模拟使用的电容参数 (图 3 — 图 9 的电容参数), 参考自文献 [22] 中的相关实验值

Table A1. The capacitance parameters used to reproduce the charge stability diagram shown in Fig.3 — Fig.9. The quantity of each parameters is cited from Ref. [22].

参数	取值
$C_{A\alpha}$	5×10^{-18} F
C_{AS}	5×10^{-18} F
$C_{A\beta}$	2.5×10^{-18} F
$C_{A\gamma}$	1×10^{-18} F
$C_{B\alpha}$	2.5×10^{-18} F
$C_{B\beta}$	5×10^{-18} F
$C_{B\gamma}$	2.5×10^{-18} F
$C_{C\alpha}$	1×10^{-18} F
$C_{C\beta}$	2.5×10^{-18} F
$C_{C\gamma}$	5×10^{-18} F
C_{CD}	5×10^{-18} F
C_{AB}	5×10^{-18} F
C_{AC}	2.5×10^{-18} F
C_{BC}	5×10^{-18} F

参考文献

[1] Fan H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 120301 (in Chinese) [范桁 2018 物理学报 **67** 120301]
 [2] Georgescu I 2020 *Nat. Rev. Phys.* **2** 666
 [3] De Leon N P, Itoh K M, Kim D, Mehta K K, Northup T E, Paik H, Palmer B S, Samarth N, Sangtawesin S, Steuerman D W 2021 *Science* **372** 253
 [4] Loss D, DiVincenzo D P 1998 *Phys. Rev. A* **57** 120
 [5] Zhang X, Li H O, Wang K, Cao G, Xiao M, Guo G P 2018 *Chin. Phys. B* **27** 020305
 [6] DiVincenzo D P 2005 *Science* **309** 217
 [7] Chatterjee A, Stevenson P, De Franceschi S, Morello A, de Leon N P, Kuemmeth F 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 157
 [8] Elzerman J M, Hanson R, Willems Van Beveren L H, Witkamp B, Vandersypen L M K, Kouwenhoven L P 2004 *Nature* **430** 431

[9] Petta J R, Johnson A C, Taylor J M, et al. 2005 *Science* **309** 2180
 [10] Koppens F H L, Buizert C, Tielrooij K J, et al. 2006 *Nature* **442** 766
 [11] Nowack K C, Koppens F H L, Nazarov Yu V, Vandersypen L M K 2007 *Nature* **318** 1430
 [12] Cao G, Li H O, Tu T, Wang L, Zhou C, Xiao M, Guo G C, Jiang H W, Guo G P 2013 *Nat. Commun.* **4** 1401
 [13] Chen B B, Wang B C, Cao G, Li H O, Xiao M, Guo G P 2017 *Sci. Bull.* **2** 712
 [14] DiVincenzo D P, Bacon D, Kempe J, Burkard G, Whaley K B 2000 *Nature* **408** 339
 [15] Russ M, Burkard G 2017 *J. Phys. Condens. Matter* **29** 393001
 [16] Gaudreau L, Studenikin S A, Sachrajda A S, Zawadzki P, Kam A 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 036807
 [17] Granger G, Gaudreau L, Kam A, et al. 2010 *Phys. Rev. B* **82** 075304
 [18] Medford J, Beil J, Taylor J M, et al. 2013 *Nat. Nanotechnol.* **8** 654
 [19] Wang B C, Cao G, Li H O, Xiao M, Guo G C, Hu X D, Jing H W, Guo G P 2017 *Phys. Rev. Appl.* **8** 064035
 [20] Schröder D, Greentree A D, Gaudreau L, Eberl K, Hollenberg L C L, Kotthaus J P, Ludwig S 2007 *Phys. Rev. B* **76** 075306
 [21] Rogge M C, Haug R J 2009 *New J. Phys.* **11** 113037
 [22] Wang J Y, Huang S Y, Huang G Y, Pan D, Zhao J H, Xu H Q. 2017 *Nano Lett.* **17** 4158
 [23] Hanson R, Kouwenhoven L P, Petta J R, Tarucha S, Vandersypen L M K 2007 *Rev. Mod. Phys.* **79** 1217
 [24] Zeng J Y 2013 *Quantum Mechanics* (Vol. 1) (5th Ed.) (Beijing: Science Press) pp81—83 (in Chinese) [曾谨言 2013 量子力学(卷I) 第五版 (北京: 科学出版社) 第81页-第83页]
 [25] Van der Wiel W G, De Franceschi S, Elzerman J M, Fujisawa T, Tarucha S, Kouwenhoven L P 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 1
 [26] Cai S S, Zhu Y, X J J 2002 *Electrodynamics* (2nd Ed.) (Beijing: Higher Education Press) p65 (in Chinese) [蔡圣善, 朱耘, 徐建军 2002 电动力学 (第二版) (高等教育出版社) 第 65 页]
 [27] Mu J W, Huang S Y, Liu Z H, Li W J, Wang J Y, Pan D, Huang G Y, Chen Y J, Zhao J H, Xu H Q 2021 *Nanoscale* **13** 3983
 [28] Pierre M, Hofheinz M, Jehl X, Sanquer M, Molas G, Vinet M, Deleoniibus S 2009 *Eur. Phys. J. B* **70** 475
 [29] Elzerman J M, Hanson R, Greidanus J S, Willems van Beveren L H, De Franceschi S, Vandersypen L M K, Tarucha S, Kouwenhoven L P 2003 *Phys. Rev. B* **67** 161308
 [30] Wang X M, Huang S Y, Wang J Y, Pan D, Zhao J H, Xu H Q 2021 *Nanoscale* **13** 1048
 [31] Li W J, Mu J W, Huang S Y, Pan D, Zhao J H, Xu H Q 2020 *Appl. Phys. Lett.* **117** 262102
 [32] Takakura T, Pioro-Ladrière M, Obata T, Shin Y S, Brunner R, Yoshida K, Taniyama T, Tarucha S 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 212104
 [33] Noiri A, Yoneda J, Nakajima T, et al. 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 153101
 [34] Greentree A D, Cole J H, Hamilton A R, Hollenberg L C L 2004 *Phys. Rev. B* **70** 235317
 [35] Van Diepen C J, Hsiao T K, Mukhopadhyay U, Reichl C, Wegscheider W, Vandersypen L M K 2021 *Nat. Commun.* **12** 77
 [36] Zajac D M, Sigillito A J, Russ M, Borjans F, Taylor J M, Burkard G, Petta J R, 2018 *Science* **359** 439
 [37] Gullans M J, Petta J R 2019 *Phys. Rev. B* **100** 085419

Charge stability diagram of serial triple quantum dots^{*}

Zhou Zheng Huang Shao-Yun[†]

(Key Laboratory for the Physics and Chemistry of Nanodevices, Beijing Key Laboratory of Quantum Devices, School of Electronics,
Peking University, Beijing 100871, China)

(Received 26 July 2022; revised manuscript received 3 October 2022)

Abstract

Serial triple quantum dot (STQD) systems have received extensive attention in the past decade, not only because quantum dot scaling up is an indispensable ingredient for integrations, but also due to the fact that specific charge states of STQD can be employed to achieve fast full-electrical manipulation of spin qubits. For the latter, a comprehensive understanding of the relationship between neighboring charge occupancy states of STQD is essential for three-electron exchange-only spin qubit-based quantum computations. Charge stability diagram is usually employed to map out the charge occupation states about the plunger gate voltages of STQDs and to study the degeneracy among charge occupation states. Experimentally, two- rather than three-dimensional charge stability diagram was obtained in a lot of early studies by keeping one of plunger gates unchanged to reduce complexity. The obtained two-dimensional diagram can only provide limited information and is subject to blurred boundary of charge occupation states due to the low tunneling current and the energy level broadening effects. It is, therefore, challenge to searching for the working points where quantum manipulation can be performed promptly and accurately.

In principle, three-dimensional charge occupation stability diagram can be efficiently constructed by numerical simulations based on constant interaction (CI) model. In this study, we calculate the electrochemical potential of STQD about three plunger gate voltages by using the CI model-based capacitance network to reproduce any desired two-dimensional charge stability diagram. The simulated diagram not only well accords with the diagrams obtained from the early experimental data of STQD, but also provides high clarity of the charge state boundaries with tunable parameters. The systematical study of two-dimensional charge stability diagram reviews the energy degeneracy triple and quadruple points of STQD charge occupation states and concludes the energy degeneracy points in three types to compare with experimental data. For each of the energy degeneracy points, we discuss both the electron and hole transport by using the electrochemical potential alignment schematics. We reveal the common and unique triple points of STQD in comparison with those of double quantum dot. The quadruple points of STQD are also addressed in the manipulation of quantum cellular automata and quantum logical gate. The comprehensive understanding of these energy degeneracy points can efficiently guide experiments to build an optimal working point of the STQD system for quantum computations and simulations.

Keywords: serial triple quantum dots, two-dimensional stability diagram, constant interaction model

PACS: 73.23.-b, 73.23.Hk, 73.63.Kv, 85.35.Gv

DOI: 10.7498/aps.72.20221512

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11974030, 92165208), the Natural Science Foundation of Beijing, China (Grant No. 1202010), and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2017YFA0204901).

[†] Corresponding author. E-mail: syhuang@pku.edu.cn

串联耦合三量子点的电荷稳态研究

周正 黄少云

Charge stability diagram of serial triple quantum dots

Zhou Zheng Huang Shao-Yun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 017301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221512

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221512>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

两量子比特系统中相互作用对高阶奇异点的影响

High-order exceptional point in a quantum system of two qubits with interaction

物理学报. 2022, 71(13): 130303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20220716>

基于三个耦合量子点的四端混合驱动制冷机

Four-terminal hybrid driven refrigerator based on three coupled quantum dots

物理学报. 2022, 71(19): 190502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220904>

自旋轨道耦合量子点系统中的量子相干

Quantum coherence in spin-orbit coupled quantum dots system

物理学报. 2022, 71(7): 078502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212111>

点间隧穿调控五能级M型三量子点电磁感应透明介质中的孤子碰撞性质

Controlling collision properties of solitons in five-level M-type triple quantum dot electromagnetically induced transparency medium by inter-dot tunneling coupling

物理学报. 2020, 69(17): 174203 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200141>

具有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的XY模型的量子相干性

Quantum coherence of XY model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2018, 67(14): 140303 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172755>

二维材料平带的实现及其新奇量子物态

Flat bands and related novel quantum states in two-dimensional systems

物理学报. 2022, 71(12): 127302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220225>