

量子点阵列几何构型对电子跃迁运输的调控*

王博维¹⁾²⁾ 商姊萌²⁾³⁾ 韩伟华^{1)2)3)†}

1) (中国科学院大学前沿交叉科学学院, 北京 100049)

2) (中国科学院半导体研究所, 半导体集成技术工程研究中心, 北京 100083)

3) (中国科学院大学, 材料与光电研究中心, 北京 100049)

(2025年6月18日收到; 2025年8月5日收到修改稿)

硅基纳米结构中杂质原子量子点阵列因其在量子计算、量子模拟等领域的巨大应用潜力而备受关注. 基于线形、环形和网状等不同几何结构排列的量子点阵列因拓扑特性的差异以及长程库仑相互作用的影响, 展现出各异的电子输运特性. 同时, 通过调控电子隧穿和波函数相位相干性, 可以深刻影响电子的跃迁输运行为. 本文致力于构建硅基纳米结构中杂质原子量子点阵列的通用 Fermi-Hubbard 模型, 探讨量子点分布的几何构型对电子的跃迁输运行为的调控机制. 特别以环形量子点阵列为例, 深入分析了不同几何结构和电子跃迁模式下的电子添加能谱与电导特性, 揭示了在位电子库仑排斥能、位间电子库仑排斥能、电子-离子实长程库仑吸引能与量子点耦合对电子跃迁行为的影响, 为理解量子点阵列几何分布对跳跃电子输运特性的调控机制提供了基本理论框架.

关键词: 量子点阵列, 电子跃迁, 几何构型, 通用 Hubbard 模型

PACS: 73.21.La, 71.10.Fd, 71.27.+a

DOI: 10.7498/aps.74.20250784

CSTR: 32037.14.aps.74.20250784

1 引言

量子点阵列作为一种人工量子系统, 因其独特的电子结构和可调控性, 在量子计算、量子模拟以及纳米电子学等领域展现出巨大的应用潜力. 近年来, 随着微纳加工技术的不断进步, 杂质原子量子点阵列的制备和操控技术取得了显著进展^[1,2]. 硅中杂质原子在低维纳米局域空间内可以形成量子点阵列, 其电子态的离散能级和库仑相互作用使其成为研究强关联电子系统和量子多体物理的理想平台, 为实验研究和理论探索提供了新机遇.

在理论研究方面, Hubbard 模型^[3] 因具有简洁性和普适性, 被广泛用于描述量子点阵列中的电子行为^[4], 通过考虑局域库仑相互作用和电子跃迁,

能够有效地捕捉量子点阵列中的基本物理现象, 如量子相变、电荷密度波和量子纠缠等. 然而, 传统的 Hubbard 模型由于对量子点阵列几何特征依赖的位间库仑相互作用缺乏描述, 以及电子的长程跃迁行为欠缺考虑, 导致其不能对复杂几何结构和复杂跃迁模式下量子点阵列的电子的输运特性进行描述. 实际上, 量子点阵列的几何结构和电子跃迁模式对其电子输运性质有着深远的影响. 线形、环形和方形等不同的几何结构的量子点阵列, 展现出不同的电子跃迁输运行为. 线形结构的量子点阵列因其简单的拓扑结构, 通常表现出两组对称的量子电导峰包络^[5]. 然而, 环形量子点阵列由于其周期性边界条件, 展现出独特的电子态简并性和拓扑特性. 这些简并态在垂直于环平面的磁场作用下会被劈裂, 导致输运性质对磁场的周期性响应^[6]. 对于

* 国家自然科学基金 (批准号: 62374157) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: weihua@semi.ac.cn

更复杂的二维量子点阵列, 其输运性质则更加丰富多样. 二维阵列中的电子不仅受到局域库仑相互作用的影响, 还受到复杂长程库仑相互作用的影响. 这些长程库仑相互作用在低填充时会导致电子向阵列中心的局域化, 从而抑制输运^[7]. 电子跃迁模式对量子点阵列的输运性能同样起着关键作用. 长程跃迁可以保护电子的相干性, 增强电子输运对无序系统的鲁棒性^[8]. 线形阵列串联量子点数量的增加会导致电导峰的高度降低, 并联量子点数量的增加会导致电导峰的高度增大^[9], 这深刻体现了量子点几何排布对于电子量子输运行为的影响.

本文旨在构建硅基纳米结构中杂质原子量子点阵列的通用 Fermi-Hubbard 模型, 通过有效欧几里得距离矩阵 D 以及邻接矩阵 A 分别描述量子点的几何分布结构和电子的跃迁模式, 探讨杂质原子量子点阵列的几何构型对电子量子输运行为的调控机制. 特别以环形二维阵列为例, 详细介绍了通用 Hubbard 模型的构建方法, 并通过对电子添加能谱与电导谱的计算, 探究不同几何结构和电子跃迁模式的二维量子点阵列中电子的输运行为. 我们期望这一研究可以为杂质原子量子点阵列的设计和应用提供基本的理论支持, 并为未来的量子技术发展奠定坚实的基础.

2 二维阵列的通用 Hubbard 模型构建方法

2.1 二维阵列几何特征的矩阵表示方法

相较于一维阵列, 二维杂质原子阵列结构能够更加丰富地调控电子的量子输运行为. 因此, 构建二维杂质原子阵列的 Fermi-Hubbard 模型, 探究电子在阵列中的输运性质具有很强的前瞻意义.

对于一维阵列, 其几何特征的描述相对简单, 只需要全部杂质原子依据次序 (由阵列一端到另一端) 进行编号, 并获取其对应坐标 x_i , 即可确定阵列的几何特性. 由于编号是按照次序进行的, 杂质原子之间的相邻关系可以直接得到. 而当阵列的维度上升到二维后, 通过仅对杂质原子依次编号的方式, 并不能显式得到杂质原子之间的相邻关系, 并且二维空间的杂质原子坐标需要有序数组 (x_i, y_i) 进行表示, 这样的表示方式在确定间距时还需额外计算, 增加了计算复杂度. 实际上, 杂质原子的绝对位置并不是我们所关心的, 我们所关心的仅

仅是杂质原子的相对位置, 也就是杂质原子间间距, 采用坐标的表示方式并不合适, 需要一种仅通过杂质原子间间距就可以确定阵列的几何形状的方法. 我们发现有效欧几里得距离矩阵 D 通过确定杂质原子间的距离可以完全且唯一表示一个二维杂质原子阵列的几何形状, 其中有效欧几里得距离矩阵 D 是一个 $N \times N$ 的矩阵, N 是阵列中的杂质原子数, 矩阵元 d_{ij} 用于描述杂质原子 i 与杂质原子 j 之间的间距.

确定了阵列的几何形状之后, 还需要确定电子在阵列中的可跃迁路径, 以描述电子的输运行为. 电子可跃迁路径可以抽象为杂质原子位点间的连通性. 我们通过邻接矩阵 A 来描述这种连通性. A 中的矩阵元 a_{ij} 用于描述位点 i 与位点 j 之间的连通关系. 若 $a_{ij} = 1$, 则称位点 i 与位点 j 之间是连通的, 即杂质原子 i 与杂质原子 j 之间电子的跃迁路径存在; 若 $a_{ij} = 0$, 则称位点 i 与位点 j 之间是非连通的, 即电子不可在杂质原子 i 与杂质原子 j 之间跃迁.

邻接矩阵 A 和有效欧几里得距离矩阵 D 将二维阵列的几何特征和电子在阵列中的跃迁路径描述成了代数方式, 这种描述方式可以最直观地描述杂质原子之间的位置关系以及电子的跃迁行为, 同时也为通过量子态操作得到 Hubbard 哈密顿矩阵及其本征值的求解提供了便利.

2.2 二维阵列的扩展 Hubbard 模型

杂质原子量子点阵列是一个具有电子关联效应的量子系统, 其系统的哈密顿量通过二次量子化的扩展 Hubbard 哈密顿量表述:

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i n_i - \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i < j} W_{ij} n_i n_j, \quad (1)$$

其中, ε_i 是电子占据杂质原子 i 时的在位能, n_i 表示杂质原子 i 上的电子数; t_{ij} 是电子在杂质原子 i 与杂质原子 j 之间隧穿的耦合强度, σ 表示电子的自旋方向, $c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ 是产生和湮灭算符; U 是在位电子排斥能, 是占据同一杂质原子上一对自旋相反的电子的库仑排斥能, $n_{i\uparrow}$, $n_{i\downarrow}$ 分别表示杂质原子 i 上的上旋电子数和下旋电子数; W_{ij} 是位间电子排斥能, 描述原子 i 上的电子与原子 j 上的电子之

间的库仑排斥.

2.2.1 量子态的表示与哈密顿矩阵的构建

求解 Fermi-Hubbard 系统的能量本征值, 需要将二次量子化表述下的 Hubbard 哈密顿量转化成哈密顿矩阵, 通过精确对角化方法求解本征值. 对于一个 N 位点 Fermi-Hubbard 系统, 选择位点占据数作为基矢来描述希尔伯特空间中的量子态:

$$|\psi_\alpha\rangle = |n_{1\uparrow}n_{2\uparrow}\cdots n_{N\uparrow}n_{1\downarrow}n_{2\downarrow}\cdots n_{N\downarrow}\rangle, \quad (2)$$

其中, $n_{i\sigma}$ 是 i 位点上自旋为 σ 的电子的占据数. 根据泡利不相容原理, 一个位点上不能占据两个自旋相同的电子, 故 $n_{i\sigma}$ 是一个二进制数 0 或 1. N 位点系统的量子态的总数为 2^{2N} , 总希尔伯特空间维度

为 2^{2N} . 根据体系的守恒量, 基矢还可以进行进一步的分类, 将总希尔伯特空间划分为一系列子空间, 在各子空间内进行哈密顿矩阵的独立对角化, 以降低对角化的计算量. 体系的总自旋数是守恒的, 并与 Hubbard 哈密顿量之间存在对易关系:

$$[\hat{H}, n_\uparrow] = [\hat{H}, n_\downarrow] = 0 \quad (3)$$

其中, $n_\uparrow = \sum_i n_{i\uparrow}$ 是上旋电子总数, $n_\downarrow = \sum_i n_{i\downarrow}$ 是下旋电子总数. 根据该对易关系, 按照上旋电子数和下旋电子数 (n_\uparrow, n_\downarrow), 可以将总希尔伯特空间划分成 $(N+1)^2$ 个子空间.

在子空间 $(n_\uparrow, n_\downarrow)$ 中选定的基矢 $\{|\psi_\alpha^{n_\uparrow, n_\downarrow}\rangle\}$ 下, 哈密顿矩阵 $H^{n_\uparrow, n_\downarrow}$ 的矩阵元为

$$H_{\alpha\beta} = \langle \psi_\alpha^{n_\uparrow, n_\downarrow} | \hat{H} | \psi_\beta^{n_\uparrow, n_\downarrow} \rangle = \begin{cases} \sum_i \varepsilon_i n_i + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i<j} W_{ij} n_i n_j, & \alpha = \beta, \\ - \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} t_{ij} \langle \psi_\alpha^{n_\uparrow, n_\downarrow} | c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} | \psi_\beta^{n_\uparrow, n_\downarrow} \rangle, & \alpha \neq \beta, \end{cases} \quad (4)$$

其中, 对角元 $H_{\alpha\alpha}$ 描述的是势能项, 包含电子和离子实之间的相互作用, 以及电子和电子之间的关联作用; 非对角项 $H_{\alpha\beta}$ 描述的是动能项, 也称为跃迁项, 由电子跳跃产生.

2.2.2 Hubbard 哈密顿矩阵的势能项

扩展 Hubbard 哈密顿矩阵的对角项就是势能项, 势能项共分成 3 项: 在位能项 $\sum_i \varepsilon_i n_i$ 描述全部电子与杂质原子间的电势能, 在位电子排斥能项 $U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ 描述所有同位点上两个自旋相反电子的排斥能, 以及位间电子排斥能项 $\sum_{i<j} W_{ij} n_i n_j$ 描述所有不同位点上电子的排斥能.

在位能 ε_i 包含了杂质原子 i 上电子受到阵列全部杂质原子的库仑作用:

$$\varepsilon_i = -E_B + \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad (5)$$

式中 E_B 是杂质原子的结合能, 其中磷原子 P 在 Si 中的杂质能级, 约为 45 meV. V_{ij} 是电子-离子实长程库仑吸引能, 描述其他离子实对杂质原子 i 上电子的库仑吸引作用:

$$V_{ij} = -V_0 \int \frac{|\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|} d\mathbf{r}, \quad (6)$$

其中, $V_0 = e^2/(4\pi\epsilon_0\epsilon_{\text{Si}})$, $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 是 Si 晶格中占

据 \mathbf{R}_i 位置孤立 P 原子上的基态电子 $1s A_1$ 多谷耦合波函数^[10], \mathbf{R}_i 和 \mathbf{R}_j 分别是杂质原子 i 和杂质原子 j 的位矢.

在位电子排斥能 U , 是同位点上一对自旋相反的电子的排斥能, 在 Si:P 体系中, 在位电子排斥能 U 等价于 P 原子 D^0 态和 D^- 态的能量差:

$$U = V_0 \int \frac{|\psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)|^2 |\psi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = E_B(D^-) - E_B(D^0) = 43.86 \text{ meV}. \quad (7)$$

位间电子排斥能 W_{ij} 描述的是杂质原子 i 上电子与杂质原子 j 上电子的库仑排斥能:

$$W_{ij} = V_0 \int \frac{|\psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)|^2 |\psi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (8)$$

将 (5) 式代入 Hubbard 哈密顿矩阵的对角项得

$$H_{\alpha\alpha} = -NE_B - \sum_i n_i \left(\sum_{i \neq j} V_{ij} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i<j} W_{ij} n_i n_j. \quad (9)$$

并将在位电子排斥能项改写成等价形式:

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1). \quad (10)$$

引入 $|\psi_\alpha\rangle$ 态的占据数基矢的描述向量 \mathbf{n}_α :

$$\mathbf{n}_\alpha = (n_1, n_2, \dots, n_N). \quad (11)$$

电子-离子实长程库仑吸引能矩阵 \mathbf{V} 和位间电子排斥能矩阵 \mathbf{W} 可以表示为:

$$\mathbf{V} = \begin{cases} V_{ij}, & i \neq j, \\ 0, & i = j, \end{cases} \quad \mathbf{W} = \begin{cases} W_{ij}, & i \neq j, \\ 0, & i = j, \end{cases} \quad (12)$$

联立 (10) 式—(12) 式, 将 (9) 式改写成矩阵形式:

$$H_{\alpha\alpha} = -E_B \mathbf{n}_\alpha \mathbf{1} + \mathbf{n}_\alpha \mathbf{V} \mathbf{1} + \frac{U}{2} \mathbf{n}_\alpha (\mathbf{n}_\alpha^T - \mathbf{1}) + \frac{1}{2} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{W} \mathbf{n}_\alpha^T, \quad (13)$$

其中, $\mathbf{1}$ 是全一列向量, 大小为 $N \times 1$, 上标 T 表示矩阵或向量的转置.

2.2.3 Hubbard 哈密顿矩阵的跃迁项

由 (2) 式可知, 量子态的占据数基矢表述是一串二进制数字, 为方便后面的矩阵运算可以将其写成一个长度为 $2N$ 的行向量 \mathbf{N} :

$$\mathbf{N} = (n_{1\uparrow}, n_{2\uparrow}, \dots, n_{N\uparrow}, n_{1\downarrow}, n_{2\downarrow}, \dots, n_{N\downarrow}), \quad (14)$$

其中, 矩阵元为 1 表示占据, 矩阵元为 0 表示未占据, 前 N 位矩阵元描述上旋电子的占据情况, 后 N 位矩阵元描述下旋电子的占据情况.

自旋为 σ 的电子从 i 格点跃迁到 j 格点要满足两个条件: 其一, 同时满足产生算符 $c_{j\sigma}^\dagger$ 和湮灭算符 $c_{i\sigma}$ 的有效性, i 格点处可以消灭一个自旋为 σ 的电子并且 j 格点处可以产生一个自旋为 σ 的电子, 即 \mathbf{N} 向量的元素 $n_{i\sigma} = 1$ 且 $n_{j\sigma} = 0$. 其二, i 格点到 j 格点之间电子可以发生跃迁, 即满足邻接矩阵 \mathbf{A} 的矩阵元 a_{ij} 和 a_{ji} 均等于 1.

在自旋为 σ 的电子跃迁发生前后, 初态 $|\psi_\alpha^{n_\uparrow, n_\downarrow}\rangle$ 与终态 $|\psi_\beta^{n_\uparrow, n_\downarrow}\rangle$ 的对应向量表示 \mathbf{N}_α^I 和 \mathbf{N}_β^F , 仅有元素 $n_{i\sigma}$ 和 $n_{j\sigma}$ 不同, \mathbf{N}_β^F 是 \mathbf{N}_α^I 中元素 $n_{i\sigma}$ 和 $n_{j\sigma}$ 互换之后的结果, 而这样的互换操作可以用大小为 $2N \times 2N$ 置换矩阵 $\mathbf{P}_{i,j,\sigma}$ 来完成:

$$\mathbf{P}_{i,j,\uparrow} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{i,j} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_{i,j,\downarrow} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{P}_{i,j} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

其中, $\mathbf{P}_{i,j}$ 表示一个 N 阶置换矩阵, 由 N 阶单位阵 \mathbf{I} 互换第 i 行和第 j 行得到. \mathbf{O} 是 N 阶零矩阵, \mathbf{I} 表示 N 阶单位阵.

初态 $|\psi_\alpha^{n_\uparrow, n_\downarrow}\rangle$ 与终态 $|\psi_\beta^{n_\uparrow, n_\downarrow}\rangle$ 所对应跃迁过程可以描述为

$$(\mathbf{N}_\beta^F)^T = \mathbf{P}_{i,j,\sigma} (\mathbf{N}_\alpha^I)^T. \quad (16)$$

同时, 在 Hubbard 矩阵中对应的元素 $H_{\langle\alpha,\beta\rangle}$ 满足:

$$H_{\langle\alpha,\beta\rangle} = -t_{ij}, \quad (17)$$

其中 $\langle\alpha,\beta\rangle$ 表示可以通过跃迁转化的两个量子态.

邻接矩阵 \mathbf{A} 中包含了全部可跃迁信息, 根据邻接矩阵 \mathbf{A} 中全部非零元素, 可以构建出置换矩阵集合 $\{\mathbf{P}_{i,j,\sigma}\}$. 利用置换矩阵集合 $\{\mathbf{P}_{i,j,\sigma}\}$ 中全部置换矩阵和初态 \mathbf{N}_α^I 作用所生成的不含 \mathbf{N}_α^I 的全部终态的集合 $\{\mathbf{N}_\beta^F\}$, 即表示态 $|\psi_\beta^{n_\uparrow, n_\downarrow}\rangle$ 在该二维阵列中可以跃迁的全部量子态 $\{|\psi_\beta^{n_\uparrow, n_\downarrow}\rangle\}$. 终态集合 $\{\mathbf{N}_\beta^F\}$ 中不含 \mathbf{N}_α^I 是显然的, 跃迁条件中给出初态 \mathbf{N}_α^I 中的 $n_{i\sigma}$ 和 $n_{j\sigma}$ 不同, 电子才可以在 i 位点和 j 位点间跃迁, 而 \mathbf{N}_β^F 是由 \mathbf{N}_α^I 中元素 $n_{i\sigma}$ 和 $n_{j\sigma}$ 互换得来, 故一定与 \mathbf{N}_α^I 不同, 因此要将终态集合 $\{\mathbf{N}_\beta^F\}$ 中和 \mathbf{N}_α^I 相同的态去除. 最后, 遍历所有初态 \mathbf{N}_α^I , 分别得到对应的终态集合 $\{\mathbf{N}_\beta^F\}$, 以确定在置换矩阵集合 $\{\mathbf{P}_{i,j,\sigma}\}$ 的作用下, 全部初态的集合 $\{\mathbf{N}^I\}$ 与全部终态的集合 $\{\mathbf{N}^F\}$ 之间的映射关系. 这种数学上的映射关系本质即为态之间的转化关系, 根据映射关系即可构建出全部 Hubbard 哈密顿中的跃迁项 $H_{\alpha\beta}$.

2.3 二维阵列的电子输运谱计算方法

2.3.1 二维阵列的电子添加能谱

构建完势能项 $H_{\alpha\alpha}$ 与跃迁项 $H_{\alpha\beta}$ 后, 即可得到子空间 $(n_\uparrow, n_\downarrow)$ 的 Hubbard 哈密顿矩阵 $\mathbf{H}^{n_\uparrow, n_\downarrow}$, 对矩阵对角化就得到了该多体系统一系列能量本征值 $E_m^{n_\uparrow, n_\downarrow}$, m 表示 $(n_\uparrow, n_\downarrow)$ 电子体系的第 m 激发态, 基态时 $m = 0$. 考虑一个总电子数为 n 的体系, 其希尔伯特空间中包含满足 $n_\uparrow + n_\downarrow = n$ 条件的全部子空间 $(n_\uparrow, n_\downarrow)$. 对空间中所有本征能级 $E_m^{n_\uparrow, n_\downarrow}$ 按能量高低重新排序, 即可得到 n 电子体系的本征能级 $E_m(n)$, 其中 $E_0(n)$ 表示 n 电子体系基态能级.

电子从电极跃迁进入阵列需要支付额外能量, 这部分的能量称为电子添加能. 第 n 个电子进入体系时, 系统由 $n-1$ 电子体系的基态跃迁至 n 电子体系的基态, n 电子体系基态与 $n-1$ 电子体系基态能量差即为第 n 个电子的添加能:

$$E_{\text{ad}}(n) = E_0(n) - E_0(n-1). \quad (18)$$

电子添加能可以理解为在多体系统中的单电子能级, 其能量间隔直接反映了系统中电子间的相

相互作用强度. 在强关联系统中, 电子添加能谱可以很好地体现在位电子排斥能 U 和耦合强度 t 间竞争作用下, 形成的两种不同的电子输运特性.

2.3.2 二维阵列的电导谱

根据隧穿速率, 在低偏压条件 ($V_{DS} \rightarrow 0$) 下构建二维阵列温度依赖的线性响应电导, 与电极化学势 μ 的关系 [5]:

$$G(\mu) = \frac{\Gamma e^2}{\hbar k_B T} \sum_{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} \sum_{\alpha, \beta, \sigma} \frac{M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(L), n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(R), n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}}{M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(L), n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} + M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(R), n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}} \times P_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} [1 - f_{FD}(E_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} - E_{\beta}^{n_\sigma - 1, n_{\bar{\sigma}}} - \mu)], \quad (19)$$

其中, f_{FD} 表示费米狄拉克分布函数; $M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(L), n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}$ 是跃迁矩阵元, 表示一个自旋为 σ 的电子从左电极隧穿进入量子点阵列中, 使阵列从 $(n_\sigma - 1, n_{\bar{\sigma}})$ 子空间中的 $|\psi_{\beta}^{n_\sigma - 1, n_{\bar{\sigma}}}\rangle$ 量子态跃迁至 $(n_\sigma, n_{\bar{\sigma}})$ 子空间中的 $|\psi_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}\rangle$ 量子态的概率:

$$\begin{cases} M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(L), n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} = \sum_{j \in L} |\langle \psi_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} | c_{j\sigma}^\dagger | \psi_{\beta}^{n_\sigma - 1, n_{\bar{\sigma}}} \rangle|^2, \\ M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(R), n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} = \sum_{j \in R} |\langle \psi_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} | c_{j\sigma}^\dagger | \psi_{\beta}^{n_\sigma - 1, n_{\bar{\sigma}}} \rangle|^2, \end{cases} \quad (20)$$

$\Gamma = 2\pi V^2$ 是一个常数, V 是左右电极和量子点阵列之间的接触势垒, 这里假设左右电极与阵列之间具有相同的接触势垒; $P_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}$ 是电子占据 $|\psi_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}\rangle$ 量子态的概率:

$$P_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} = \frac{\exp[-(E_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} - n\mu)/k_B T]}{\sum_{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}, \alpha} \exp[-(E_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}} - n\mu)/k_B T]}, \quad (21)$$

其中, $E_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}$ 和 $E_{\beta}^{n_\sigma - 1, n_{\bar{\sigma}}}$ 分别对应 $|\psi_{\alpha}^{n_\sigma, n_{\bar{\sigma}}}\rangle$ 量子态和 $|\psi_{\beta}^{n_\sigma - 1, n_{\bar{\sigma}}}\rangle$ 量子态的本征能量.

3 环形阵列中的电子输运

3.1 环形阵列的几何特征和跃迁特性表述

为方便讨论类氢杂质原子量子点阵列中电子的输运特性, 假设杂质原子在硅纳米片沟道的二维空间中是有序分布的, 基元具有中心旋转对称性, 如图 1 所示, 基元中的杂质原子以正多边形的方式排布在一个圆周上, 构成了环形阵列. 硅纳米片沟道与源漏相连接, 源漏之间的偏压 (V_{DS}) 趋近于零, 杂质原子上电子的化学势仅由栅压 (V_{GS}) 控制. 为理解有序二维阵列中电子的输运特性, 假设

电子跃迁仅在单个基元内进行, 且仅考虑一个基元内杂质原子及电子的库仑作用, 由此将二维空间有序分布杂质原子阵列中的电子输运问题转化为基元对应环形阵列中的电子输运问题. 通过解析 Fermi-Hubbard 阵列中电子输运的本质规律, 对强关联系统中电子的跃迁行为开展深入探究.

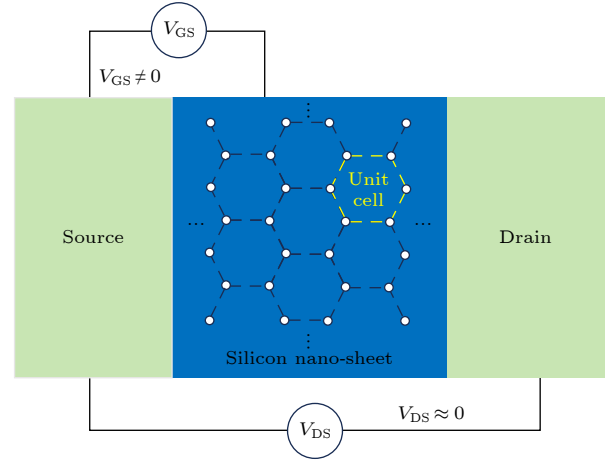


图 1 硅基杂质原子晶体管结构示意图

Fig. 1. The schematic structure of silicon-based dopant atom transistor.

杂质原子量子点阵列中电子的输运特性主要受到阵列几何结构与电子跃迁模式的控制, 而几何结构和电子跃迁模式又可以由有效欧几里得距离矩阵 D 和邻接矩阵 A 所唯一表述.

对于一个 N 位点的环形阵列, 将杂质原子按照顺时针依次从 1 到 N 编号, 如图 2(a) 所示, 根据正多边形的几何关系, 如图 2(b) 所示, 可以推导出杂质原子 i 与杂质原子 j 之间的间距 d_{ij} 满足:

$$\begin{cases} d = R \sin(\theta/2), \\ d_{ij} = R \sin(\theta_{ij}/2), \\ \theta_{ij} = |i - j|\theta. \end{cases}$$

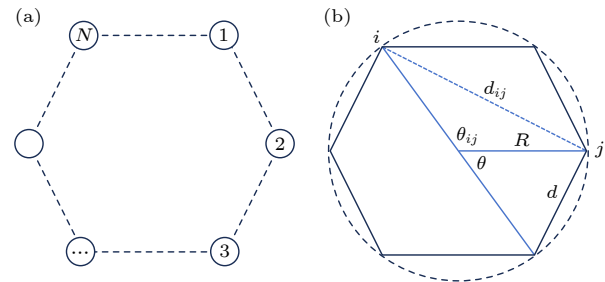


图 2 (a) 环形阵列杂质原子分布; (b) 正多边形的几何关系

Fig. 2. (a) The distribution of annular array dopant atoms; (b) the geometric relationships of regular polygons.

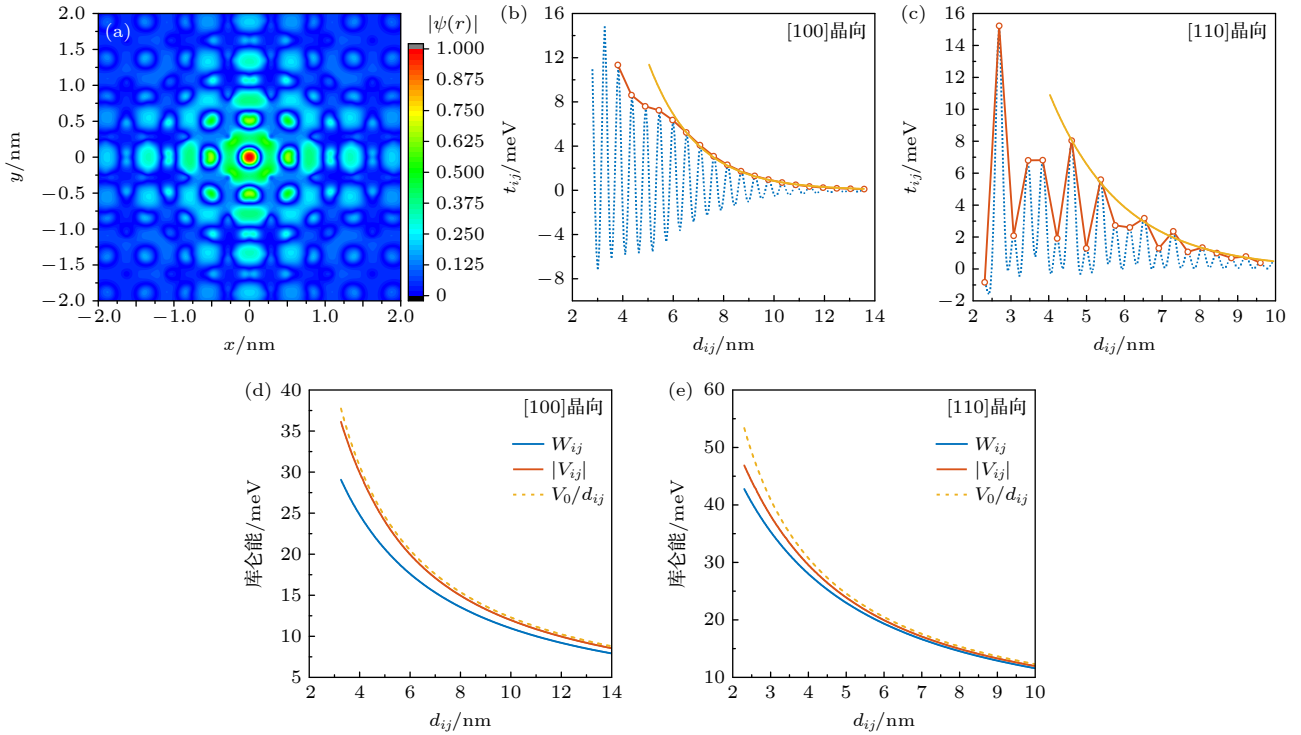


图 3 (a) 束缚在硅中孤立 P 杂质原子上的电子基态 $1sA_1$ 多谷耦合波函数; (b) 沿 [100] 晶向排列的杂质原子的耦合强度 t_{ij} 随杂质原子间间距 d_{ij} 的关系; (c) 沿 [110] 晶向排列的杂质原子的耦合强度 t_{ij} 随杂质原子间间距 d_{ij} 的关系; (d) 沿 [100] 晶向排列的杂质原子的长程库仑吸引能 V_{ij} 位间电子排斥能 W_{ij} 随杂质原子间间距 d_{ij} 的关系; (e) 沿 [110] 晶向排列的杂质原子的长程库仑吸引能 V_{ij} 位间电子排斥能 W_{ij} 随杂质原子间间距 d_{ij} 的关系

Fig. 3. (a) The ground state $1sA_1$ multi-valley coupled wavefunction of the electron bound to isolated P donor atoms in silicon; (b) the relationship between the coupling strength t_{ij} of dopant atoms arranged along the [100] crystal direction and the distance d_{ij} between dopant atoms; (c) the relationship between the coupling strength t_{ij} of dopant atoms arranged along the [110] crystal direction and the distance d_{ij} between dopant atoms; (d) the relationship between the long-range Coulomb attraction energy V_{ij} , the inter-site electron repulsion energy W_{ij} and the distance d_{ij} between impurity atoms arranged along the [100] crystal direction; (e) the relationship between the long-range Coulomb attraction energy V_{ij} , the inter-site electron repulsion energy W_{ij} and the distance d_{ij} between impurity atoms arranged along the [110] crystal direction.

将 (22) 式中的环形阵列杂质原子间距关系代入 (25) 式, 可以得到:

$$t_{ij} \approx t_0 \exp\left(-\frac{d}{a_B} \csc \frac{\pi}{N} \sin \frac{|i-j|\pi}{N}\right), \quad (26)$$

其中, t_0 可以通过拟合杂质原子间距较大时, t_{ij} 与杂质原子间间距 d_{ij} 关系得到. 对于 [100] 晶向, $t_0 \approx 160$ meV; 对于 [110] 晶向, $t_0 \approx 90$ meV. 而在长间距近似下, 耦合强度 t_{ij} 很小, 几何构型带来的 t_{ij} 大小变化不大, 可以将阵列中各个原子间的耦合强度近似看成一致的, 并用一个耦合强度 t 来描述整个体系的近似耦合强度:

$$\begin{aligned} t_{ij} &\approx t_0 \exp\left(-\frac{d}{a_B} \csc \frac{\pi}{N} \sin \frac{|i-j|\pi}{N}\right) \\ &\approx t_0 \exp(-d/a_B) = t. \end{aligned} \quad (27)$$

长程库仑吸引能 V_{ij} 、位间电子排斥能 W_{ij} 与杂质原子间间距 d_{ij} 呈现出近似的反比关系, 并且

存在大小关系 $|V_{ij}| > |W_{ij}|$, 并随着杂质原子间间距 d_{ij} 的增大而趋近相等, 退化成点电荷之间的电势能关系. 利用静电场的格林函数 $G(\mathbf{R})$ 改写 (6) 式和 (8) 式可以得到:

$$\begin{cases} V_{ij}(\mathbf{R}) = -V_0 \int \frac{|\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|} d\mathbf{r} = -[\psi^2 * G](\mathbf{R}), \\ W_{ij}(\mathbf{R}) = V_0 \int \frac{|\psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)|^2 |\psi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ = -[\psi^2 * V_{ij}](\mathbf{R}) = [\psi^2 * \psi^2 * G](\mathbf{R}), \end{cases} \quad (28)$$

其中, “*” 表示卷积运算, $G(\mathbf{R}) = V_0/|\mathbf{R}|$ 是静电场的格林函数, 并且 $\mathbf{R} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. 波函数的全空间扩展使得等效电荷密度分散到了全空间, 相当于将原点电荷“扩散”到空间不同位置. 电荷分布范围越广, 电荷聚集度越低, 电场强度越弱, 电势能越小. 若杂质原子间距离 d_{ij} 远远大于电荷分布的尺度,

电荷分布相对于观测点可以视为一个“点”，电势能也退化成和点电荷电势能相当. 而在类氢杂质体系中，当杂质原子间距离 d_{ij} 超过玻尔半径 a_B 数倍时就可以当成点电荷处理了.

因此，杂质原子间距离 d_{ij} 很大 ($d \geq 8$ nm) 时，可以用点电荷电势能用去近似长程库仑吸引能 V_{ij} 和位间电子排斥能 W_{ij} 的数值：

$$\begin{aligned} W_{ij} &\approx -V_{ij} \approx \frac{V_0}{d_{ij}} = \frac{V_0}{d} \sin \frac{\pi}{N} \csc \frac{|i-j|\pi}{N} \\ &= W \sin \frac{\pi}{N} \csc \frac{|i-j|\pi}{N}, \end{aligned} \quad (29)$$

其中， $W = V_0/d$ 是最近邻原子上电子的位间电子排斥能.

3.3 环形阵列的电子添加能谱

电子添加能谱描述的是向杂质原子系统中添加或移除一个电子所需能量的分布，反映了单粒子激发特性. 电子添加能谱中有两个重要参数，一个是能带宽度，另一个是能隙大小. 其中，能带宽度表征电子的离域化能力，带宽越大表明电子离域性越强，反之则局域性越强；能隙表示激发电子需克服的电子强相关作用库仑排斥势垒，能隙越大则表

示需要克服更大的库仑排斥，进而表现出更强的局域性，反之则表现出更强的离域性^[9]. 带宽揭示其导电性，而能隙揭示其绝缘性，两者的竞争关系揭示关联效应或量子有序的本质，共同刻画了多体强相关系统中电子的动力学行为.

杂质原子量子点阵列电子添加能的能带展宽和库仑能隙大小受三个能量参数控制，分别是在位电子排斥能 U 、耦合强度 t 及最近邻杂质原子上电子的位间电子排斥能 W . 下文将探究三个能量参数对库仑能隙和能带展宽的影响，并在无位间电子排斥作用的环形阵列和存在位间电子排斥作用的环形阵列中进行讨论.

若系统中不存在位间电子排斥作用，仅存在在位电子排斥能 U 和耦合强度 t . 为保证 (27) 式和 (29) 式中的近似关系成立，选用 $d = 8$ nm 时的能量参数进行模拟，此时 $E_B = -45.5$ meV, $U = 43.86$ meV, $t = 1.34$ meV, 如图 4 所示. 可以看出在能带极限 ($U \gg t$) 下，能带展宽仅和耦合强度有关，并随着耦合强度的增大而增大. 在耦合强度相同的情况下，NNH, NNNH 与 LRH 三种跃迁模型的能带展宽依次增大. 为解释上述现象，采用紧束缚近似计算能带极限下耦合强度带来的能带展宽^[14]:

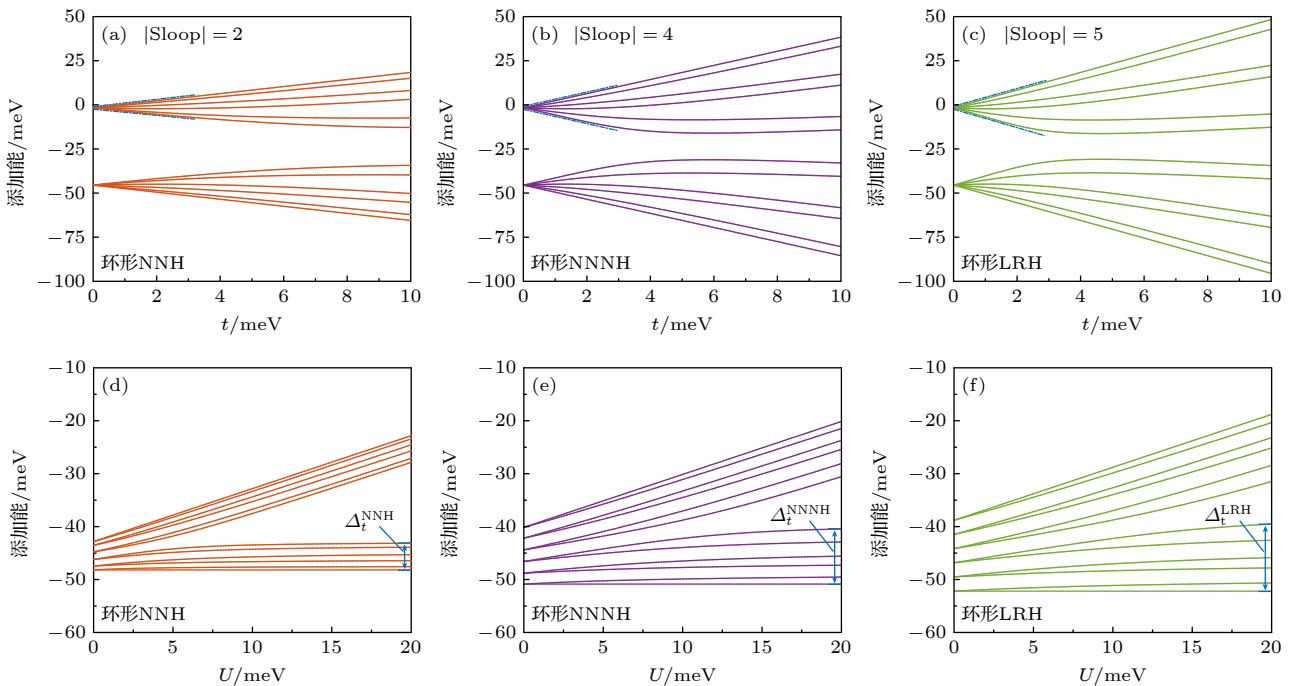


图 4 环形阵列 ($N = 6$) 的电子添加能，红色为 NNH 模型、紫色为 NNNH 模型、绿色为 LRH 模型 (a)–(c) 耦合强度对阵列电子添加能的影响 ($U = 43.86$ meV); (d)–(f) 位间电子排斥能对于阵列电子添加能的影响 ($t = 1.34$ meV)

Fig. 4. The addition energy spectra of a 6-site annular array with the red representing NNH model, the purple representing NNNH model, and the green representing LRH model: (a)–(c) the influence of coupling strength t_{ij} on addition energy spectra of the array; (d)–(f) the influence of inter-site Coulomb interaction U on addition energy spectra of the array.

$\Delta_t = 2 \sum z_i t_i$. 其中, z_i 表示杂质原子的第 i 近邻配位数, $i = 1$ 表示最近邻, $i = 2$ 表示次近邻, 以此类推; t_i 表示杂质原子与第 i 近邻杂质原子间的耦合强度. 而在能带极限下, 杂质原子间的耦合强度 t 近似相同, 能带展宽进一步简化为

$$\Delta_t = \left(2 \sum z_i\right) \cdot t. \quad (30)$$

故在低耦合体系中, 由耦合强度引起的能带展宽与耦合强度呈现线性关系, 能带宽度随着耦合强度的增大而线性增加, 比例系数是 $2 \sum z_i$, 是电子的可跃迁路径数 (电子可以跃迁到达的位点数) 的两倍. NNH, NNNH 和 LRH 三种跃迁模型的跃迁路径数分别为 2, 4 和 $N - 1$. 在 $N = 6$ 的环形阵列中, 三种模型的跃迁路径数分别为 2, 4, 5, 紧束缚近似下能带展宽分别为 $\Delta_t^{\text{NNH}} = 5.36 \text{ meV}$, $\Delta_t^{\text{NNNH}} = 10.72 \text{ meV}$, $\Delta_t^{\text{LRH}} = 13.4 \text{ meV}$, 实测结果为 $\Delta_t^{\text{NNH}} = 5.22 \text{ meV}$, $\Delta_t^{\text{NNNH}} = 10.81 \text{ meV}$, $\Delta_t^{\text{LRH}} = 13.65 \text{ meV}$, 近似结果与实测结果相差在 5% 以下, 证明低耦合体系由耦合强度带来的能带展宽与跃迁路径数成正比, NNH, NNNH 和 LRH 模型的能带展宽依次增大. 在能带极限下, 能带展宽进行数学处理后, 还可以写成:

$$\begin{aligned} \Delta_t &\approx \left. \frac{\partial \Delta_t}{\partial t} \right|_{t=0} \cdot t = \left. \frac{\partial (E_{\text{ad}}(2N) - E_{\text{ad}}(N))}{\partial t} \right|_{t=0} \cdot t \\ &\approx 2 \left. \frac{\partial (E_{\text{ad}}(2N))}{\partial t} \right|_{t=0} \cdot t. \end{aligned} \quad (31)$$

对比 (30) 式与 (31) 式可知:

$$\left. \frac{\partial (E_{\text{ad}}(2N))}{\partial t} \right|_{t=0} = \sum z_i,$$

即电子添加能最高能级的斜率等于电子的跃迁路径数. 如图 4(a)—(c), NNH, NNNH 和 LRH 模型最高能级斜率刚好约为 2, 4, 5, 近似结果非常好.

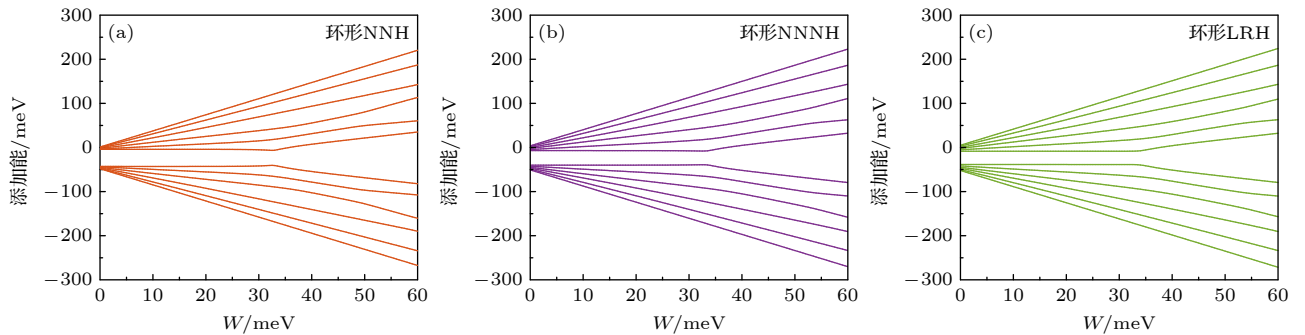


图 5 最近邻库仑排斥能 W 对 6 位点环形阵列电子添加能谱的调制作用 (a) NNH 模型; (b) NNNH 模型; (c) LRH 模型

Fig. 5. The modulation effect of the nearest-neighbor Coulomb repulsion energy W on the electron addition energy spectrum of a 6-site annular array: (a) NNH model; (b) NNNH model; (c) LRH model.

库仑能隙的大小同时受到在位电子排斥能 U 和耦合强度 t 的影响, 其大小表征体系局域化能力. 当在位电子排斥能 U 增大时, 库仑能隙扩张, 局域化加强; 而当耦合强度 t 增大时, 库仑能隙减小, 局域化加强. 为定量描述 U 和 t 竞争下的表观库仑能隙大小, 引入有效的库仑能隙 U_{eff} , 在能带极限下约为在位电子排斥能 U 与能带宽度 Δ 的差值^[15]:

$$U_{\text{eff}} \approx U - \Delta = U - \left(2 \sum z_i\right) \cdot t. \quad (32)$$

对于 NNH, NNNH 与 LRH 三个模型, 由于三者的跃迁路径数依次递增, 由 (32) 式可知, 其库仑能隙依次递减, 局域化能力依次递增, 与模型假设一致. 在 Fermi-Hubbard 系统中, U 和 t 的竞争还会导致电子输运性质的变化, 由导体转变形成 Mott 绝缘体, 而这一转变的关键在于有效库仑能隙 U_{eff} 的正负. 有效库仑能隙 $U_{\text{eff}} > 0$ 时, 体系表现为 Mott 绝缘态; 而当 $U_{\text{eff}} < 0$ 时, 体系表现为金属态^[16]. 用 (32) 式的近似关系, 令 $U_{\text{eff}} = 0$, 可以定性得出不同跃迁模型输运特性转变时, U 和 t 的临界比:

$$\left(\frac{U}{t}\right)_{\text{crit}} \approx 2 \sum z_i. \quad (33)$$

因此, 跃迁路径数越多的体系, 需要更大的在位电子排斥能才能发生局域化, 局域化程度更高; 而跃迁路径数越少的体系, 需要更大的耦合强度才能发生局域化, 局域化的程度更高.

对于存在在位电子排斥能的体系, 有效库仑能隙的大小 U_{eff} 和能带宽度 Δ 的大小均会发生变化. 图 5 分别模拟了 NNH 模型、NNNH 模型和 LRH 模型下位间电子排斥能对电子添加能的影响. 可以看出库仑能隙随着最近邻位间电子排斥能 W 的增大, 先不变后增大, 同时伴随着次级能隙的形成, 这种变化是在位电子排斥能 U 与位间电子排斥能 W_{ij} 共同作用下, 电子排布方式发生变化所导致的.

在位电子排斥能 U 占据主导地位的阵列中, 电子会倾向于以单占据的占据方式占据尽可能多的位点以避免增大在位库仑排斥能, 实现能量最低. 而在单占据的占据方式下, 被占据的杂质原子和电子组成一个等效的中性粒子, 该等效中性粒子对其他电子合库仑作用为零, 即位间电子排斥能 W_{ij} 和长程库仑吸引能 V_{ij} 发生了完全抵消^[7]. 而在在位电子排斥能 U 占据主导地位的近半满阵列中, 电子数比位点数少一, 电子全部采用单占据的方式, 此时体系中只存在一个带电的杂质原子. 若向该体系中填充一个电子, 该电子与其他电子的位间电子排斥能以及该电子与其他杂质原子离子实之间的长程库仑吸引能达到了平衡, 使得 $E_{ad}(N)$ 不随 W 变化. 同理, 对于半满阵列, 电子数等于位点数的体系, 其电子添加能 $E_{ad}(N+1)$ 也与位间电子排斥能无关. 而库仑能隙的大小, 即为两个电子添加能的差值 $E_{ad}(N+1) - E_{ad}(N)$, 不随位间电子排斥能的变化而变化.

在位间电子排斥能 W_{ij} 占据主导的阵列中, 库仑能隙的大小随着 W 的增大出现显著的扩张, 并且形成具有多个子带的能带结构. 这是由于随着 W 的增大, 位间电子的库仑排斥作用将超过在位电子的库仑排斥, 因此电子将为了避免引入位间排斥而采用双占据的填充模式. 此时, 电离杂质和电子将不能形成中性粒子, 电子添加能将会受到位间电子排斥能的影响, 库仑能隙的大小也随着 W 的增大而增大. 因此, 在位间电子排斥能 W_{ij} 与在位电子排斥能 U 的竞争过程中, 一定存在一个电子排布重构的临界点 $\alpha = U/W$, 使得全位点单占据模式和间隔位点双占据模式能量相等, 临界点前后电子排布模式发生变化. 为求解这个临界点 α , 我们需要对两种占据模式的能量进行计算, 假设体系为半满阵列, 杂质原子数和电子数均为 N , 杂质原子间几乎不存在耦合作用, 此时间隔双占据的能量 E_1 以及全格点单占据的能量为 E_2 可以表示为

$$\begin{cases} E_1 = -E_B \mathbf{n}_1 \mathbf{1} + \mathbf{n}_1 \mathbf{V} \mathbf{1} + \frac{U}{2} \mathbf{n}_1 (\mathbf{n}_1^T - \mathbf{1}) + \frac{1}{2} \mathbf{n}_1 \mathbf{W} \mathbf{n}_1^T, \\ E_2 = -E_B \mathbf{n}_2 \mathbf{1} + \mathbf{n}_2 \mathbf{V} \mathbf{1} + \frac{1}{2} \mathbf{n}_2 \mathbf{W} \mathbf{n}_2^T, \end{cases} \quad (34)$$

其中, \mathbf{n}_1 表示间隔双占据的占据模式, 当 N 为偶

数时 $\mathbf{n}_1 = (2, 0, 2, 0, \dots)$, 当 N 为奇数时 $\mathbf{n}_1 = (1, 2, 0, 2, 0, \dots)$. $\mathbf{n}_2 = (1, 1, 1, \dots)$ 表示全格位点单占据的占据模式. 当 $E_1 = E_2$ 时, 即可求解出临界点 α :

$$\alpha = \frac{U}{W} = \frac{2(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1) \mathbf{V} \mathbf{1} + \mathbf{n}_2 \mathbf{W} \mathbf{n}_2^T - \mathbf{n}_1 \mathbf{W} \mathbf{n}_1^T}{W \mathbf{n}_1 (\mathbf{n}_1^T - \mathbf{1})}. \quad (35)$$

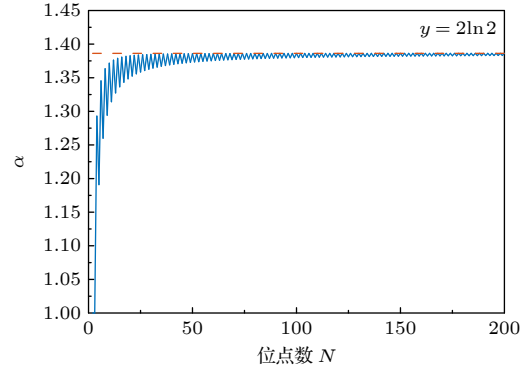


图 6 电子排布重构临界点 α 随位点数 N 的变化关系
Fig. 6. Relationship between the criticality index α of electronic configuration reconstruction and the site number N .

根据以上关系, 我们计算 N 位点系统的电子排布重构临界点 α , 如图 6 所示. 结果发现, 无论是位点数是奇数的情况, 还是位点数是偶数的情况, 在体系中都仅存在一个临界点, 而且这个临界点随着位点数增加而增加的, 由于位点数是奇数或偶数电子的排布方式并不完全相同, 因此奇数子列和偶数子列之间是振荡的, 但随着位点数 N 的增加, 两个子列同时收敛于同一个常数. 将 \mathbf{n}_2 和 \mathbf{n}_1 的表达式代入 (35) 式并进行近似:

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\mathbf{n}_2 \mathbf{W} \mathbf{n}_2^T - \mathbf{n}_1 \mathbf{W} \mathbf{n}_1^T}{2 \cdot W \cdot N/2} \\ \approx \frac{\mathbf{n}_2 \mathbf{W} \mathbf{n}_2^T - \mathbf{n}_1 \mathbf{W} \mathbf{n}_1^T}{NW}, \\ \mathbf{n}_2 \mathbf{W} \mathbf{n}_2^T \approx 2W \sum_{k=1}^{N-1} \left(\frac{N}{k} - 1 \right) \\ = 2WN (\ln N + \gamma - 1), \\ \mathbf{n}_1 \mathbf{W} \mathbf{n}_1^T \approx 4W \sum_{k=1}^{N/2-1} \left(\frac{N}{k} - 1 \right) \\ = 2WN [\ln(N/2) + \gamma - 1], \end{cases}$$

联立求解出临界点的极限值:

$$\alpha_{\text{lim}} = \frac{U}{W} \approx \frac{2WN (\ln N + \gamma - 1) - 2WN [\ln(N/2) + \gamma - 1]}{NW} = 2 \ln 2 \approx 1.386. \quad (36)$$

求解得到的临界点的数值, 与图 6 中的仿真结果一致, 证明计算结果是正确的. 当位点数 $N = 6$ 时, 临界点为 $\alpha = 1.345$, 转变临界处对应的 $W_{\text{crit}} = 32.60 \text{ meV}$, 这与图 5 中库仑能隙发生扩张的值非常接近, 因此可以认为较大位间电子排斥作用下库仑能隙的增大是由于电子排布方式的变化产生的.

而当体系中存在位间电子排斥能和长程库仑吸引能时, 电子添加能谱还会进行额外的展宽 Δ_W . 在 $W < W_{\text{crit}}$ (临界值) 的前提下, 这个展宽关于最近邻位间电子排斥能 W 是线性的, 由此能带的总展宽可以写成:

$$\Delta = \Delta_t + \Delta_W = \left(2 \sum z_i\right) \cdot t + \beta W, \quad (37)$$

其中 β 是由于位间电子排斥产生的能带展宽与最近邻位间电子排斥能之比, 后面简称为关联展宽系数. 能带的总展宽根据定义还可以写成:

$$\Delta = E_{\text{ad}}(2N) - E_{\text{ad}}(N+1) = E_{\text{ad}}(N) - E_{\text{ad}}(1). \quad (38)$$

联立 (37) 式和 (38) 式, 解出关联展宽系数 β :

$$\beta = \frac{\partial \Delta}{\partial W} = \frac{\partial(E_{\text{ad}}(2N) - E_{\text{ad}}(N+1))}{\partial W}.$$

由于在小于临界值 W_{crit} 的情况下, $E_{\text{ad}}(N+1)$ 不随 W 变化, 因此,

$$\beta = \frac{\partial \Delta}{\partial W} = \frac{\partial(E_{\text{ad}}(2N))}{\partial W}, \quad (39)$$

$E_{\text{ad}}(2N)$ 是阵列中最后一个电子的电子添加能, 在耦合强度 t 很小的情况下, 可以将电子近似看成是完全局域的, 系统依照能量最小原理具有唯一的排布方式. 此时, 添加最后一个电子需要克服与其他 $N-1$ 个全满位点上电子的位间库仑排斥能、与 $N-1$ 个杂质原子间的长程库仑吸引能, 以及与相同位点上电子的在位电子排斥能:

$$\begin{aligned} E_{\text{ad}}(2N) &= U + 2 \sum_{i=1}^{N-1} W_{iN} + \sum_{i=1}^{N-1} V_{iN} \\ &= U + W \sum_{k=1}^{N-1} \sin \frac{\pi}{N} \csc \frac{k\pi}{N}. \end{aligned} \quad (40)$$

联立 (37) 式、(39) 式和 (40) 式, 解出关联展宽系数 β 和总能带展宽 Δ :

$$\begin{cases} \beta = \sum_{k=1}^{N-1} \sin \frac{\pi}{N} \csc \frac{k\pi}{N}, \\ \Delta = \left(2 \sum z_i\right) \cdot t + \left(\sum_{k=1}^{N-1} \sin \frac{\pi}{N} \csc \frac{k\pi}{N}\right) W, \end{cases} \quad (41)$$

可以看出关联展宽系数 β 是一个只跟几何因素有关的系数. 对于 6 位点环形阵列, 所对应的 $\beta \approx 3.654$, 与图 5 中电子添加能对 W 的斜率一致. 而当 N 很大时, 有近似关系:

$$\begin{cases} \sin \frac{\pi}{N} \approx \frac{\pi}{N}, \\ \sum_{k=1}^{N-1} \csc \frac{k\pi}{N} \approx 2 \frac{N}{\pi} \left(\ln \frac{2N}{\pi} + \gamma\right), \end{cases} \quad (42)$$

将 (42) 式代入 (41) 式, 可以发现 N 很大时 β 和位点数 N 呈现近对数关系:

$$\beta \approx 2 \left(\ln \frac{2N}{\pi} + \gamma\right), \quad (43)$$

其中, $\gamma = 0.5772156649$ 是欧拉常数.

图 7 描述了关联展宽系数 β 随位点数 N 的变化关系以及近似关系, 可以看出用 (43) 式对数关系近似的 β 值与 (41) 式计算的精确值误差较小, 且位点数 N 越大对数近似效果越好, 在多位点环形阵列中, 可以采用这种近似方法估算由位间电子排斥能所带来的能带展宽.

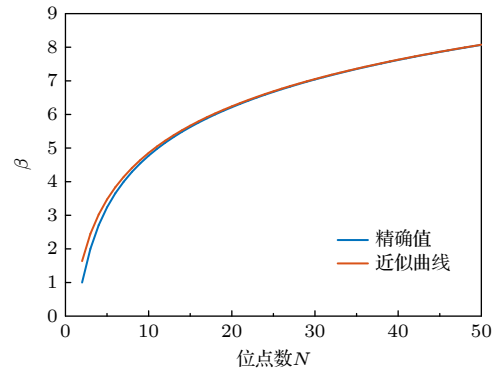


图 7 环形阵列中关联展宽系数 β 随位点数 N 的关系
Fig. 7. Relationship between the correlation broadening coefficient β and the number of sites N in an annular array.

3.4 环形阵列的量子电导

杂质原子阵列的量子电导由电子跃迁或隧穿产生, 其强度和分布强依赖于阵列的几何特征和温度. 杂质原子量子点的几何特征通过库仑势的大小及分布直接调控位间电子排斥能 W 和耦合强度 t 的相对大小, 使系统中电子的局域化程度发生变化, 进而导致输运方式在跃迁、隧穿两种模式间变化. 这种输运方式的变化可以在量子点耦合阵列的电子添加能谱结构及量子电导谱中电导峰位和峰高的分布中反映出来. 温度则会直接影响电子的

能量分布, 导致电子输运方式变化. 本部分将通过分析比较线形阵列、环形阵列这两种几何特征不同的杂质原子量子点阵列温度依赖的电导特性来探究各能量参数、阵列几何形状、电子不同跃迁模式(NNH, NNNH, LRH) 以及温度对电子输运的影响.

我们在极低温条件 $T = 2.3 \text{ K}$ 下, 使用杂质原子间距 $d = 8 \text{ nm}$ 时的能量参数进行了模拟. 通过改变其中的单个能量参数以探究该能量参数对线性阵列和环形阵列的电导特性的影响, 如图 8 所示. 为保证由共振隧穿带来的能级展宽可以忽略, 模拟时假设隧穿速率 $\Gamma = 1 \mu\text{eV}$ 远小于添加能中同一子带相邻能级的间距 ΔE_{ad} :

$$\Delta E_{\text{ad}} = E_{\text{ad}}(n+1) - E_{\text{ad}}(n), \quad n \neq N,$$

其中, n 是阵列中的电子数, N 是位点数. 在极低温

下, 由温度带来的电导峰展宽很小, 对应曲线沿 x 轴方向的线宽 δ , 这个线宽可以用电导峰半峰宽(FWHM)^[17] 来估计:

$$\delta \approx 2 \times \text{FWHM} = 2 \times 3.52 k_{\text{B}} T \approx 1.4 \text{ meV}. \quad (44)$$

可以看出, 半峰宽仅和温度有关, 能量参数的改变并不会导致电导峰半峰宽的显著变化, 表现为图 8 中曲线的线宽不随能量参数变化. 而且在低温下, 子峰的峰位始终是和阵列的电子添加能一致^[18], 对比图 8 中高亮曲线与图 4 和图 5 中电子添加能谱即可看出. 这是由于在低温下, 量子点阵列中的电子仅能处于基态, 跃迁进入阵列的电子使阵列从 n 电子体系的基态跃迁至 $n+1$ 电子体系的基态, 体系增大的能量由第 $n+1$ 个电子的化学势 μ_{n+1} 来补偿, 因此跃迁进入阵列的第 $n+1$ 个电子的化

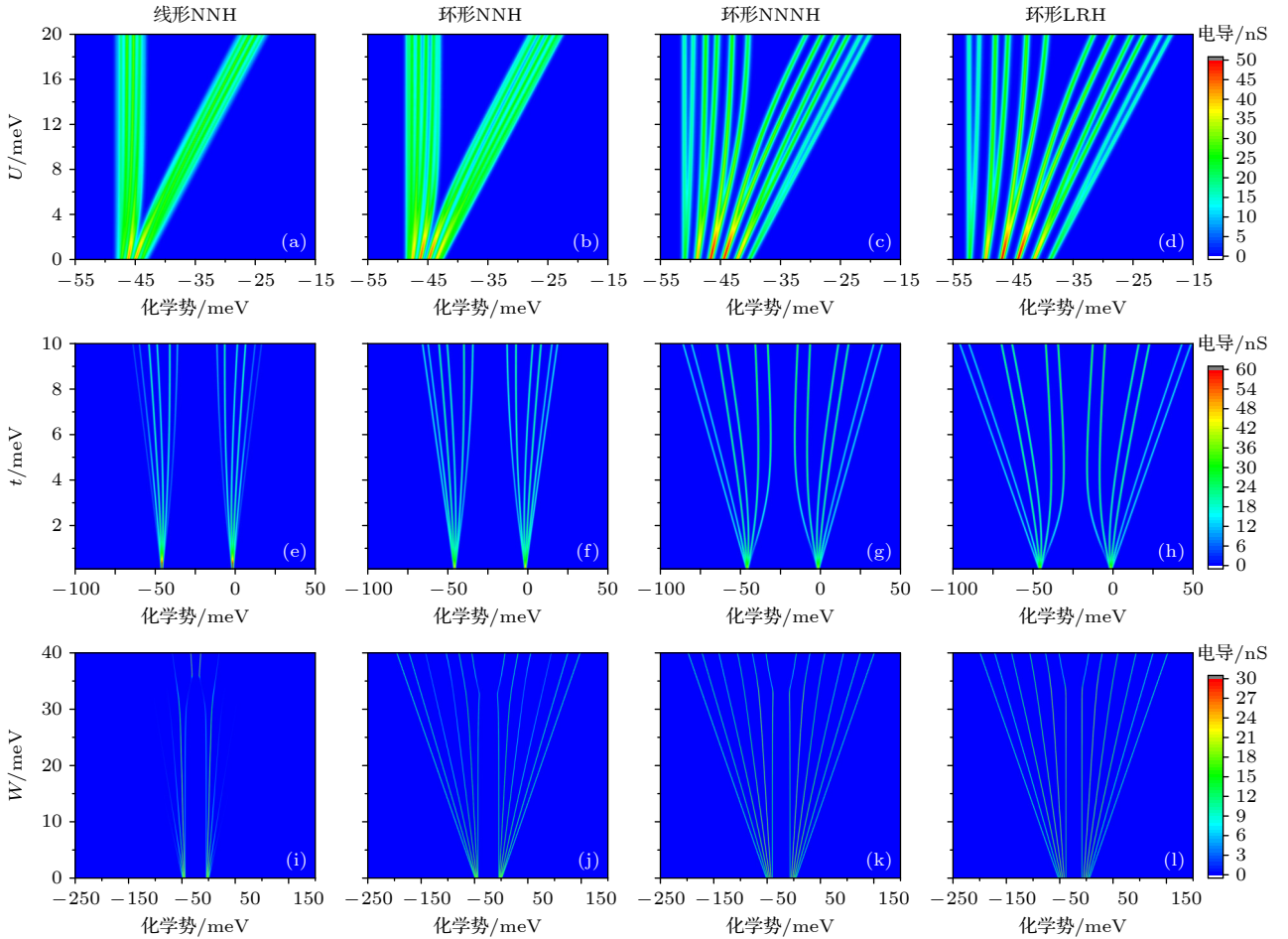


图 8 杂质原子阵列的电导特性对能量参数的响应规律 (a)–(d) 耦合强度 t 对电导特性的影响; (e)–(h) 在位电子排斥能 U 对电导特性的影响; (i)–(l) 最近邻位间电子排斥能 W 对电导特性的影响; (a), (e), (i) 仅存在最近邻跃迁的一维阵列; (b), (f), (j) NNH 环形阵列; (c), (g), (k) NNNH 环形阵列; (d), (h), (l) LRH 环形阵列

Fig. 8. The response of conductance characteristics to energy parameters in dopant-atom arrays: (a)–(d) The influence of coupling strength t on conductance; (e)–(h) the influence of on-site electron repulsion energy U on conductance; (i)–(l) the influence of nearest-neighbor inter-site electron repulsion energy W on conductance; (a), (e), (i) An 1D dopant-atom array with only nearest-neighbor hopping electrons; (b), (f), (j) NNH annular array; (c), (g), (k) NNNH annular array; (d), (h), (l) LRH annular array.

学势与阵列第 $n + 1$ 个电子的电子添加能一致:

$$\mu_{n+1} = E_0(n + 1) - E_0(n) = E_{ad}(n + 1). \quad (45)$$

杂质原子量子点的分布也会对量子电导产生非常显著的影响^[19], 主要体现在两方面: 一方面, 阵列的几何形状会影响量子点中电子波函数的扩展能力, 导致电导子峰的峰高差异, 从图 8(a), (e) 所示曲线的颜色可以看出, 线性阵列上、下 Hubbard 能带边缘的子峰电导比能带中心子峰电导小得多, 而环形阵列子峰电导则相对平均. 这是由于线性阵列具有开放边界, 波函数在边缘衰减, 形成局域边缘态. 在较低的填充状态下, 电子倾向于占据阵列中心位点^[7], 电子难以向电极跃迁, 因此电导峰的高度低. 随着阵列电子填充数量的增加, 电子会逐渐开始占据边缘位点, 向电极跃迁的概率增大. 当电子数超过位点数时, 下 Hubbard 带填满, 上 Hubbard 带中的电子参与输运, 整体呈现出两个对称的钟形分布的电导包络. 而环形阵列的边界是周期性的, 正向和反向传播的电子会形成驻波形式的波函数, 没有边缘态的形成, 电子占据各个位点的几率是近似相同的, 所对应电导峰峰高差异小于线形阵列. 如图 8(b)—(d) 和图 8(f)—(h), 虽然环形阵列也是表现出上、下 Hubbard 能带形式的两个电导包络, 但整体的电导强度要更加的平均. 相较于线形阵列, 环形阵列的边缘曲线轮廓更加清晰, 具有更高的边缘子峰电导. 另一方面, 阵列几何形状显著影响位间电子排斥能, 通过空间中电子的关联效应, 影响隧穿过程, 从而重新调制电导峰的高度与位置. 从图 8(i)—(l) 可以看出, 一维阵列受到位间电子排斥能影响要比环形二维阵列大得多, 随着位间电子排斥能的增大, 曲线的颜色逐渐接近背景色, 特别是能带边缘处的曲线, 输运严重受到抑制, 而二维阵列受到的影响却很小. 这是由于一维阵列中, 电子只能沿单一方向运动, 位间电子库仑排斥作用的方向与电子输运的方向完全一致, 最大程度阻碍了电子输运, 直接且强烈地影响电子的分布和动力学行为, 表现为电导的急剧降低, 分布相较于没有位间电子排斥能的体系出现很大的变化. 而在环形阵列中, 电子可以沿多个方向输运, 位间库仑排斥作用的方向和电子输运方向并不完全一致, 电子可以向位间排斥小的方向进行输运. 因此, 位间电子排斥能对于二维输运的抑制现象并不显著, 并且随着跃迁路径的增加, 电子的输

运方向将更加复杂, 位间电子排斥能对电子输运的抑制效应会进一步减小.

跃迁模式对于电导谱的影响主要体现在跃迁路径数上, 跃迁路径数越多的系统具有更高的平均电导. 这是由于根据 (17) 式, 跃迁路径数量越多的系统对应的可跃迁位点对 $\{i, j\}$ 的数量越多, 进而可跃迁态 $\langle \alpha, \beta \rangle$ 也就越多. 而量子电导和跃迁矩阵元 $M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(L), n_{\sigma}, n_{\bar{\sigma}}}$ 与 $M_{\alpha, \beta, \sigma}^{(R), n_{\sigma}, n_{\bar{\sigma}}}$ 直接相关, 其中仅可跃迁态 $\langle \alpha, \beta \rangle$ 对应跃迁矩阵元非零, 对量子电导有贡献, 如 (20) 式所示. 因此, 跃迁路径数越多的系统, 可跃迁态 $\langle \alpha, \beta \rangle$ 数量越多, 具有更多的非零跃迁矩阵元, 系统平均量子电导也会更高. 这一现象在图 8 中可以明显看出, NNH, NNNH 与 LRH 模型曲线与背景的对比度逐渐增大, 这意味着三个模型的平均电导依次递增, 而这三个模型的差别仅在于跃迁路径数不同, 由此说明三个模型平均电导的不同是由跃迁路径数差异直接造成的. 但平均电导的增大并不意味着 NNH, NNNH 与 LRH 三个模型中每组对应的电导峰峰高都依次增大, 如图 8 所示, NNH 模型能带中心处子峰电导要比其他模型都大, 这个特性在图 9 中体现更加明显. 这是由于跃迁模式还会影响电子沿不同路径跃迁的概率, 进而调制电导的大小. 跃迁模式实质上还是描述的杂质原子间的耦合作用, 即电子只有在发生耦合的杂质原子间才可以跃迁. 而经由不同路径跃迁到达电极的电子, 其跃迁概率是不一样的, 随着跃迁路径增加, 到达电极的电子输运路径更加复杂, 导致电导峰的大小进行重新调制. 图 8 中不同跃迁模式的电导分布存在明显差异, 即使阵列几何特征相同, 若跃迁模式不同, 其电导包络形状也有明显的差异, 这种差异正是来源于跃迁路径增加所导致的跃迁概率变化.

为探究温度对阵列电导特性的影响, 我们使用杂质原子间距 $d = 8 \text{ nm}$ 时的能量参数, 研究了最近邻跃迁模式下线形阵列以及三种不同跃迁模式下环形阵列的变温电导特性, 如图 9 所示, 模拟时假设隧穿速率 $\Gamma = 1 \mu\text{eV}$.

由图 9 可以看出, 随着温度的升高, 电导峰的高度下降, 半峰宽扩张, 最终多个电导峰发生耦合而不可区分, 形成两个 Hubbard 能带的电导包络^[20]. 根据电子共振隧穿的电导公式^[17], 可以得到第 n 个电导峰所对应的近似峰型:

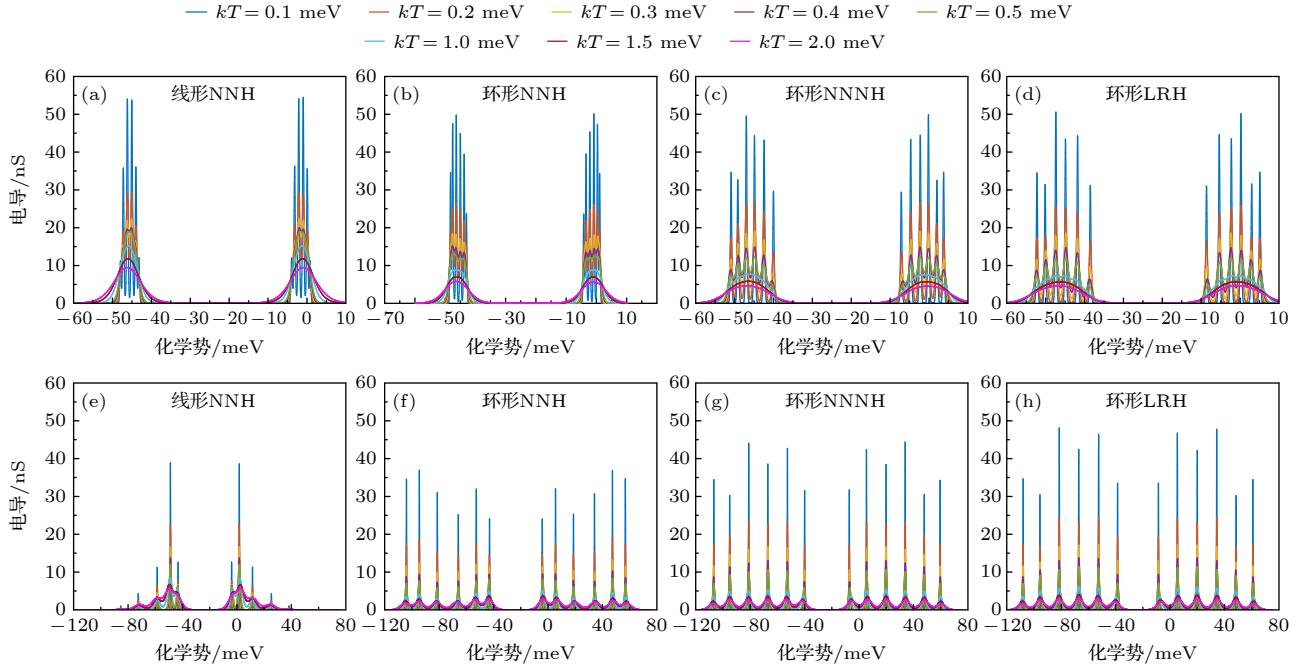


图9 不同杂质原子阵列的温度依赖的电导特性 (a)–(d) 无位间电子排斥能和长程库仑吸引能体系; (e)–(h) 存在位间电子排斥能和长程库仑吸引能体系; (a), (e) 仅存在最近邻跃迁的一维阵列; (b), (f) NNH 环形阵列; (c), (g) NNNH 环形阵列; (d), (h) LRH 环形阵列

Fig. 9. Temperature-dependent conductance characteristics of the dopant-atom arrays: (a)–(d) Systems without inter-site repulsion W_{ij} and long-range attraction V_{ij} ; (e)–(h) systems with inter-site repulsion W_{ij} and long-range attraction V_{ij} ; (a), (e) An 1D dopant-atom array with only nearest-neighbor hopping electrons; (b), (f) NNH annular array; (c), (g) NNNH annular array; (d), (h) LRH annular array.

$$G_n(\mu) \approx \frac{G_0}{4k_B T} \text{sech}^2 \left[\frac{\mu - E_{ad}(n)}{2k_B T} \right], \quad (46)$$

其中, G_0 是一个与跃迁速率有关的常数. 根据 (46) 式电导和温度的关系, 电导的最大值 $G_0/(4k_B T)$ 和 $1/T$ 成正比, 说明电导峰的峰高会随着温度升高呈现反比下降. 同时, 由 (44) 式中电导峰半峰宽 (FWHM) 与温度的关系可知, 电导峰的半峰宽会随着温度的升高而扩展. 当温度足够高时, 多个电导峰发生展宽, 进而耦合而不可分辨. 因此, 要明显地观察到杂质原子量子点阵列中的量子现象, 必须保证电导峰可被区分, 这需要满足电导峰的峰位间距 (也就是电子添加能差值) 的最小值远大于半峰宽的一半 [21]:

$$\min(\Delta E_{ad}) \gg \frac{1}{2} \text{FWHM} \approx 1.76 k_B T, \quad (47)$$

能够实现峰位间距增大的最佳方法是让上、下 Hubbard 能带发生展宽, 能带展宽后电子添加能谱中的能级间距 ΔE_{ad} 增大, 子峰间峰位间距也会相应的展宽. 如图 9(b)–(d) 所示, NNH, NNNH, LRH 三种模型的能带宽度依次提高, 所对应电导子峰的峰位间距也有不同程度的增大. 使得能带展

宽的因素共两个, 一个是耦合强度 t , 另一个是最近邻位间电子排斥能 W . 在弱耦合极限下 ($U \gg t$) 且 $U \geq 1.345 W$ 时, 这两个因素所带来的能带展宽都是线性的. 若系统中不存在位间电子排斥能, 能带展宽 Δ 完全由耦合强度 t 决定, 若假设同一个 Hubbard 子带中电子添加能级间距 ΔE_{ad} 是相等的, 则:

$$\Delta = \left(2 \sum z_i \right) \cdot t \approx (N-1) \cdot \Delta E_{ad}. \quad (48)$$

联立 (47) 式和 (48) 式可知, 仅在耦合作用下所需的最小耦合强度 t 约为

$$t \gg \frac{(N-1)}{\sum z_i} \times 1.76 k_B T. \quad (49)$$

对于 $N=6$ 环形阵列的 NNH, NNNH, LRH 三种模型, 想要实现室温下量子电导峰可分辨的最小耦合强度分别为 $t_{\text{NNH}} = 114 \text{ meV}$, $t_{\text{NNNH}} = 57.2 \text{ meV}$, $t_{\text{LRH}} = 45.76 \text{ meV}$. 而事实上, 这种量级的耦合强度在实际系统中不可能实现, 如图 3 所示, 这需要位间电子排斥能的引入以进一步增大能级间距. 由于最近邻位间电子排斥能 W 导致的能级间距增大

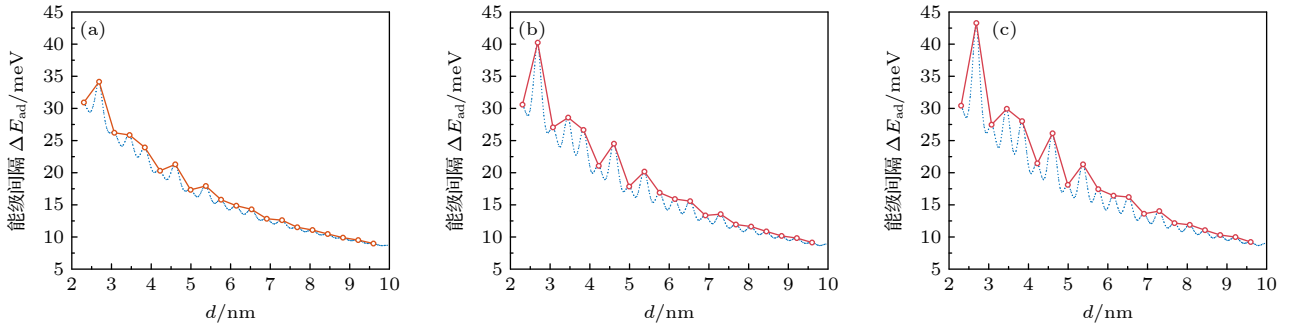


图 10 电子添加能级间距 (电导子峰间距) ΔE_{ad} 随最近邻杂质原子间距 d 的变化关系 (a) NNH 模型; (b) NNNH 模型; (c) LRH 模型

Fig. 10. Dependence of electron addition energy level spacing ΔE_{ad} (corresponding to conductance sub-peak spacing) spacing on nearest-neighbor dopant-induced separation d : (a) NNH model; (b) NNNH model; (c) LRH model.

也是线性的, 则电子添加能谱能级间距 ΔE_{ad} , 耦合强度 t 和最近邻位间电子排斥能 W 有以下关系:

$$\Delta = \left(2 \sum z_i \right) \cdot t + \left(\sum_{k=1}^{N-1} \sin \frac{\pi}{N} \csc \frac{k\pi}{N} \right) \cdot W$$

$$\approx (N-1) \cdot \Delta E_{\text{ad}}. \quad (50)$$

联立 (47) 式和 (50) 式可得

$$\Delta E_{\text{ad}} \approx \left(\frac{2 \sum z_i}{N-1} \right) \cdot t + \frac{\sum_{k=1}^{N-1} \sin \frac{\pi}{N} \csc \frac{k\pi}{N}}{N-1} \cdot W$$

$$\gg 1.76 k_{\text{B}} T. \quad (51)$$

因此, 想要实现量子效应的高温保持, 需要确定合适的杂质原子间间距 d_{ij} , 以使耦合强度 t 与最近邻位间电子排斥能 W 带来的能带展宽大于由温度带来的电导峰的热展宽. 为此, 我们计算了电子添加能级间距 ΔE_{ad} 随最近邻杂质原子间距 d 的变化关系, 如图 10 所示, 原子的间距愈小, 则电子波函数的交叠愈大, 导致分裂添加的能级能量间距 ΔE_{ad} 振荡增大. 在室温 300 K 下, $1.76 k_{\text{B}} T \approx 45.8 \text{ meV}$, 需要杂质原子间距在 2.7 nm 左右, 所对应掺杂浓度约为 $5.2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

4 结 论

本文搭建了硅中类氢杂质原子阵列 Fermi-Hubbard 量子系统的通用模型. 模型使用有效欧几里得距离矩阵 \mathbf{D} 描述杂质原子间的几何关系, 结合邻接矩阵 \mathbf{A} 表述电子在阵列中的跃迁模式, 可以适用于一维、二维以及三维杂质原子阵列电子输运特性模拟. 基于该通用模型, 我们模拟了最简

单的具有中心旋转对称基元的二维环形阵列的电子添加能谱, 通过分析 Hubbard 哈密顿量中各个参数对电子添加能谱的能带展宽和能隙大小的影响, 揭示了 Fermi-Hubbard 系统量子运输的影响因素. 结果表明, 在低耦合极限下由耦合强度 t 和最近邻位间电子排斥能 W 各自带来的能带展宽均是线性的, 比例系数分别为两倍跃迁路径数 $2 \sum z_i$ 和只跟几何因素有关的关联展宽系数 β . 能隙大小和电子排布重构临界 α 有关: 当 $U/W < \alpha$ 时, 能隙仅由 U 和 t 竞争决定, 低耦合极限下, 能隙与 U 和 t 均呈现线性关系; 当 $U/W > \alpha$ 后, U 和 W 竞争导致电子排布方式变化. 在这种排布方式下, 能隙大小受到 U , t , W 三者共同作用. 此外, 我们还根据阵列的电子添加能, 计算了电导谱, 并分析了阵列几何形状、电子跃迁模式、各能量参数以及温度对于电子运输的影响. 阵列几何形状直接影响库仑相互作用调制电子运输, 在位间电子排斥能 W_{ij} 的影响下, 一维阵列的运输严重受阻, 而二维阵列由于电子运输方向和位间电子排斥作用的方向不共线, 其电子运输受到位间电子排斥作用的影响比一维要小. 阵列中电子跃迁模式也会影响电子运输导致电导差异, 跃迁路径越多的系统, 电子的跃迁行为更复杂, 相应的非零跃迁矩阵元也就越多, 平均电导越高. 能量参数对电子运输的影响体现在两方面, 一方面是由在位电子排斥能 U 、最近邻位间电子排斥能 W 与耦合强度 t 共同作用下的电导峰位变化; 另一方面是最近邻位间电子排斥能 W 和耦合强度 t 通过影响电子跃迁概率, 调制子峰高度分布, 导致不同体系的电导包络形状差异. 温度对电导谱的影响, 主要体现在电导峰峰值

下降和半峰宽的展宽两方面,半峰宽的展宽会导致多个电导峰发生耦合而难以区分,需要合适的杂质原子间距确定合适的能带展宽,以保证电导峰的可区分性,进而实现在高温下量子效应的保持.

硅中类氢杂质原子阵列 Fermi-Hubbard 量子系统的通用模型可以用于研究 Fermi-Hubbard 系统中强关联效应、Anderson-Mott 转变机制、非常规超导现象等新奇的强关联量子物理现象的底层物理机制,也可揭示硅晶体管中复杂的多体物理电子强关联效应,为基于类氢杂质原子工作的杂质原子晶体管及其阵列的设计和开发提供理论依据,并有望揭示从单个原子量子点到多个原子量子点级联的载流子输运行为转变规律,为实现杂质原子晶体管的大规模集成和应用奠定理论基础.

数据可用性说明

本篇论文的关联数据可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00184> 中访问获取.

参考文献

- [1] Prati E, Hori M, Guagliardo F, Ferrari G, Shinada T 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 443
- [2] Wang X Q, Khatami E, Fei F, Wyrick J, Namboodiri P, Kashid R, Rigosi A F, Bryant G, Silver R 2022 *Nat. Commun.* **13** 6824
- [3] Hubbard J 1963 *Proc. Ro. Soc. London A* **276** 238
- [4] Beenakker C W J 1991 *Phys. Rev. B* **44** 1646
- [5] Chen G, Klimeck G, Datta S, Chen G, Goddard W A 1994 *Phys. Rev. B* **50** 8035
- [6] Yu Z M, Johnson A T, Heinzl T 1998 *Phys. Rev. B* **58** 13830
- [7] Le N H, Fisher A J, Ginossar E 2017 *Phys. Rev. B* **96** 245406
- [8] Wang S S, Li K, Dai Y M, Wang H H, Zhang Y C, Zhang Y Y 2023 *Sci. Rep.* **13** 5763
- [9] Devi S, Ahluwalia P K, Chand S 2020 *Pramana* **94** 60
- [10] Gamble J K, Jacobson N T, Nielsen E, Baczewski A D, Moussa J E, Montaño I, Muller R P 2015 *Phys. Rev. B* **91** 235318
- [11] Hu X, Koiller B, Das Sarma S 2005 *Phys. Rev. B* **71** 235332
- [12] Weber B, Mahapatra S, Ryu H, Lee S, Fuhrer A, Reusch T C G, Thompson D L, Lee W C T, Klimeck G, Hollenberg L C L, Simmons M Y 2012 *Science* **335** 64
- [13] Voisin B, Bocquel J, Tankasala A, Usman M, Salfi J, Rahman R, Simmons M, Hollenberg L, Rogge S 2020 *Nat. Commun.* **11** 6124
- [14] Slater J C, Koster G F 1954 *Phys. Rev.* **94** 1498
- [15] Grzybowski P R, Chhajlany R W 2012 *Phys. Status Solidi B* **249** 2231
- [16] Janod E, Tranchant J, Corraze B, Querré M, Stoliar P, Rozenberg M, Cren T, Roditchev D, Phuoc V T, Besland M P 2015 *Adv. Funct. Mater.* **25** 6287
- [17] Morgan N Y, Abusch-Magder D, Kastner M A, Takahashi Y, Tamura H, Murase K 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 410
- [18] Cha M H, Hwang J 2020 *Sci. Rep.* **10** 16701
- [19] Ochoa M A, Liu K, Zieliński M, Bryant G 2024 *Phys. Rev. B* **109** 205412
- [20] Gerace D, Pavarini E, Andreani L C 2002 *Phys. Rev. B* **65** 155331
- [21] Yi K S, Trivedi K, Floresca H C, Yuk H, Hu W, Kim M J 2011 *Nano Lett.* **11** 5465

Transport of electron hopping regulated by geometric configuration of quantum-dot arrays*

WANG Bowei¹⁾²⁾ SHANG Zimeng²⁾³⁾ HAN Weihua^{1)2)3)†}

1) (*School of Advanced Interdisciplinary Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

2) (*Engineering Research Center for Semiconductor Integrated Technology, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

3) (*Center of Materials Science and Optoelectronics Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

(Received 18 June 2025; revised manuscript received 5 August 2025)

Abstract

Dopant-induced quantum dot arrays in silicon-based nanostructures have received much attention due to their great potential applications in fields such as quantum computing and quantum simulation. When quantum dots are arranged in different geometric configurations such as linear, annular, or grid shapes, the differences in their inherent topological properties will lead to significantly different spatial distributions of the Coulomb interaction potential. The potential field distribution directly affects the phase coherence of electron wavefunctions, thereby regulating the dynamic behaviors of electrons such as electron tunneling and hopping between quantum dots, and greatly influencing the electron transport properties in the system.

Our study aims to establish a basic theoretical framework to clarify the regulation mechanism of quantum dot geometric configurations on electron hopping transport. Therefore, we construct a generalized Fermi-Hubbard model for silicon-based dopant-induced quantum dot arrays. The model defines the distance between quantum dots through an effective Euclidean distance matrix (\mathbf{D}), which uniquely determines the geometric shape of the array, and defines the allowed electron hopping modes through an adjacency matrix (\mathbf{A}). Using the framework and exact diagonalization method, we perform detailed numerical simulations on the electron transport properties in the traditional unit cell of two-dimensional ordered distribution dopant-induced quantum dot arrays. Generally, the primitive unit of a two-dimensional orderly distributed dopant-induced quantum dot array is a regular polygon that satisfies specific translational and rotational symmetries. We thereby refer to the quantum dot arrays distributed according to regular polygons as annular arrays.

The geometric features of annular quantum dot arrays and the electron hopping modes including nearest-neighbor hopping (NNH), next-nearest-neighbor hopping (NNNH) and long-range hopping (LRH), exhibit significant regulation of the electron addition energy and quantum conductance. The regulation arises from interactions of key energy parameters, including coupling strength (t), on-site Coulomb repulsion (U) and inter-site Coulomb repulsion (W). In the electron addition energy spectrum, such a regulation is manifested in two aspects: energy band broadening and Coulomb gap size. Band broadening is co-regulated by t and W . Under weak coupling conditions, the broadening Δ_t induced by coupling strength is proportional to t , with its proportional coefficient increasing with the number of hopping paths (LRH > NNNH > NNH). The broadening Δ_W caused by inter-site Coulomb repulsion is proportional to W , with the proportional coefficient being β , which is a geometry-dependent correlation broadening coefficient. In multi-site annular arrays, β exhibits a logarithmic relationship with the site number N . The size of Coulomb gap is co-influenced by U , t and W . The competition between U and W determines the electron configuration mode (dominated by single-electron occupation of sites or double-electrons occupation of spaced sites), with a critical value α for electron configuration reconstruction that causes a change in electron configuration across the threshold. When $U/W > \alpha$, single-electron occupation dominates, and the gap is determined by the competition between U and t ; when

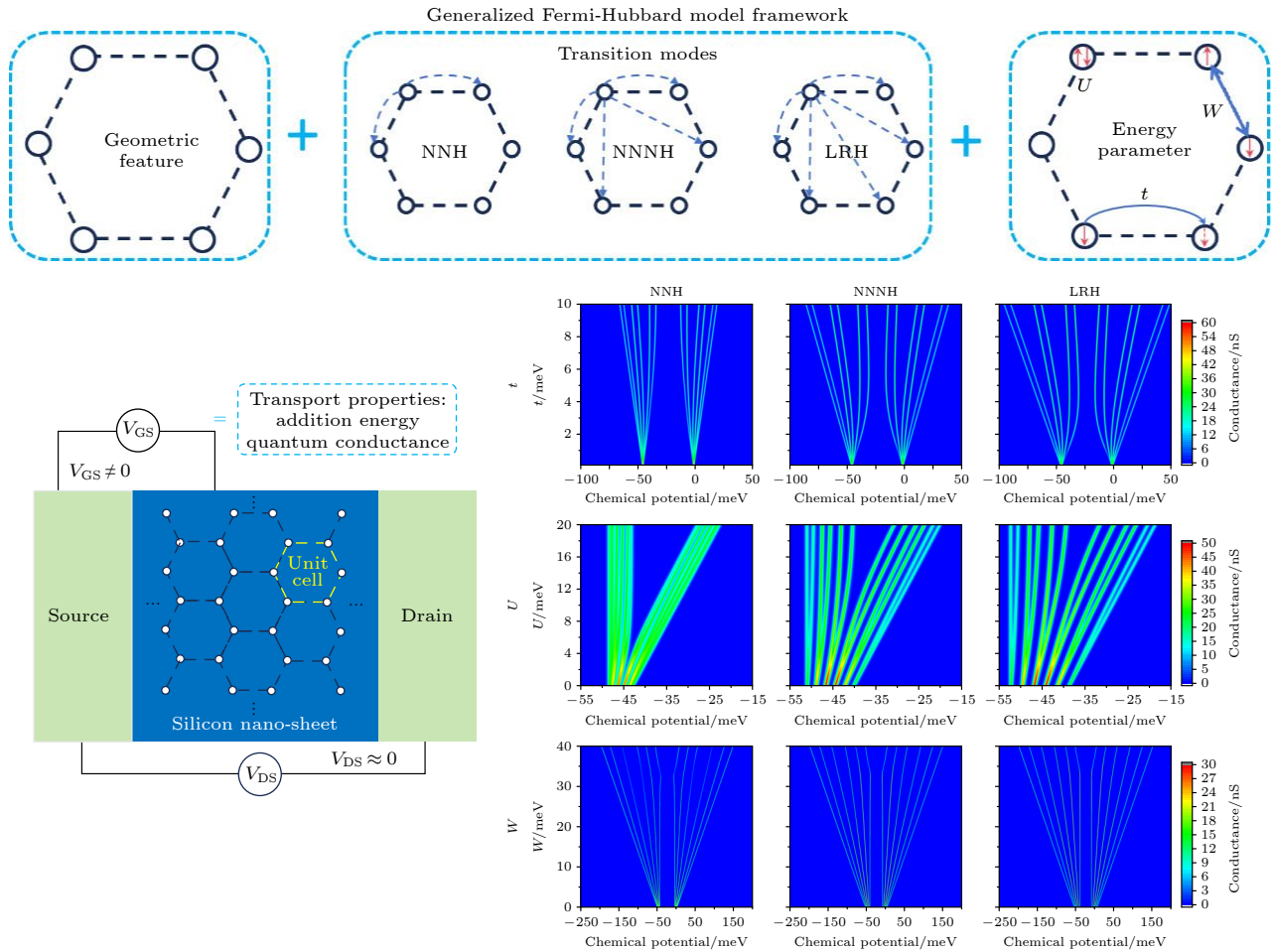
* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62374157).

† Corresponding author. E-mail: weihua@semi.ac.cn

$U/W < \alpha$, double-electrons occupation dominates, the gap expands under the influence of W , accompanied by the formation of sub-bands.

In the quantum conductance spectrum, regulation is reflected by the distribution of conductance peak intensity. Geometric configurations significantly affect peak intensity distribution. Linear arrays exhibit concentrated peak intensities due to edge states formed by open boundaries, while annular arrays with periodic boundaries and no edge states show more uniform peak distributions. Additionally, in annular arrays, the electron transport direction is non-collinear with the inter-site repulsion direction, endowing them with stronger robustness against transport inhibition induced by W . The influence of hopping modes is twofold. More hopping paths (LRH > NNNH > NNH) result in more non-zero hopping matrix elements, which causes higher average conductance. Meanwhile, hopping paths affect the phase coherence of wavefunctions, modulating the intensity of individual conductance peaks and forming distinct distribution.

In conclusion, we establish a theoretical framework to clarify the physical mechanism, in which the geometric configurations and electron hopping modes of silicon-based dopant-induced quantum dot arrays regulate electron transport properties through synergistic interactions with key energy parameters (t , U , W). Electron addition energy spectra and quantum conductance spectra reveal the regulatory rules of these factors on electron transport behaviors, providing a theoretical guidance for optimally designing silicon-based quantum devices.



Keywords: quantum dot arrays, electron hopping, geometric configuration, generalized extended Fermi-Hubbard model

PACS: 73.21.La, 71.10.Fd, 71.27.+a

DOI: 10.7498/aps.74.20250784

CSTR: 32037.14.aps.74.20250784



量子点阵列几何构型对电子跃迁运输的调控

王博维 商姊萌 韩伟华

Transport of electron hopping regulated by geometric configuration of quantum-dot arrays

WANG Bowei SHANG Zimeng HAN Weihua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 197301 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250784

CSTR: 32037.14.aps.74.20250784

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250784>

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

基于哈伯德模型的超冷原子量子模拟研究进展

Recent research progress of ultracold-atom quantum simulation of Fermi-Hubbard model

物理学报. 2025, 74(1): 017101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241595>

能级构型对InAs/GaAs量子点电磁感应透明介质中光孤子存储的影响

Effect of energy level configuration on storage of optical solitons in InAs/GaAs quantum dot electromagnetically induced transparency medium

物理学报. 2023, 72(8): 084204 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221965>

基于CHSH不等式几何解释的“X”态量子非局域关联检验

Quantum nonlocal test of “X” state based on geometric interpretation of CHSH inequality

物理学报. 2022, 71(17): 170302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220445>

基于动力学量子几何张量的多能级系统布居转移的优化控制

Optimal control of population transfer in multi-level systems by dynamical quantum geometric tensor

物理学报. 2025, 74(10): 100304 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250210>

分数量子霍尔液体中的几何自由度及类引力子元激发

Geometric degrees of freedom and graviton-like excitations in fractional quantum Hall liquids

物理学报. 2024, 73(17): 177801 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240994>

分子动力学中的几何相位

Geometric phase in molecular dynamics

物理学报. 2025, 74(15): 150201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250388>