

球壳量子点中极化子和量子比特的声子效应*

赵翠兰[†] 丛银川

(内蒙古民族大学物理与电子信息学院, 通辽 028043)

(2012 年 2 月 13 日收到; 2012 年 3 月 15 日收到修改稿)

采用求解能量本征方程、LLP 么正变换、变分相结合的方法研究球壳量子点中极化子和量子比特的声子效应. 数值计算表明: 声子效应使极化子的基态 (或激发态) 能量小于电子的基态 (或激发态) 能量, 使量子比特的振荡周期减小, 且内径给定时, 随着外径的增大声子效应对极化子和量子比特振荡周期的影响越大; 声子效应不改变量子比特内电子概率密度分布的幅值, 量子比特内中心球面处概率密度幅值最大, 界面处概率密度为零, 其它处的概率密度幅值介于最大和最小之间, 且各个空间点的概率密度随半径和方位角的变化而变化, 随时间做周期性振荡.

关键词: 球壳量子点, 极化子, 量子比特, 概率密度

PACS: 63.20.kd, 71.38.-k

1 引言

自从 1982 年 Feynman^[1,2] 提出按照量子力学规律工作的计算机的概念后, 开始了对量子计算机的理论和实验研究. 量子计算机是遵循量子力学性质、规律进行高速数学和逻辑计算、存储及处理量子信息的物理设备. 当某个设备处理和计算的是量子信息, 运行的是量子算法时, 它就是真正意义上的量子计算机. 量子计算机的信息存储和处理单位是量子比特, 许多两态量子系统均可作为量子比特的载体. 而对于量子计算的实现, 人们已经提出诸多方案^[3-6], 其中量子点计算方案尤被关注, 原因是量子点生长可控, 易于实现. 目前, 利用量子点来实现量子比特已经成为量子信息领域的研究热点. 早期, Li 等^[7] 提出利用量子点中的二能级体系作为一个量子比特的方案并利用外加电场来增加消相干时间. 后来人们又提出了一个构造量子点量子比特的新方案^[8], 利用激子来储存量子信息, 与常规量子点量子比特相比, 相干性大为改善. 另外, 其他一些低维纳米结构中的二能级体系

也被建议作为量子比特, 如量子环结构^[9]、球壳型量子点^[10].

由于量子点尺度小, 所以其极化子和量子比特的声子效应更明显. 许多学者对纳米结构中电子与声子之间的相互作用进行了研究^[11-13]. Stauber 等^[14] 利用平均场理论研究了量子点中与光学声子和声学声子相关的极化子弛豫. Harouni 等^[15] 研究了声子对球型量子点光学性质的影响. Xiao 等^[16-19] 利用 LLP (Lee-Low-Pines) 么正变换和变分相结合的方法研究了量子棒中强耦合极化子和束缚极化子的性质. 文献 [20, 21] 利用求解能量本征方程、LLP 么正变换和变分相结合的方法研究了声子对量子环中量子比特的影响; 进一步又研究了外磁场对量子环中极化子性质的影响.

量子点作为一种重要的低维纳米结构, 已经引起了人们的广泛关注, 目前实验上可以制备各种形状的半导体量子点, 其中一类是量子点量子阱结构^[22-27]. Chang 和 Xiao^[28] 采用有效质量包罗函数理论, 研究了量子点量子阱结构中电子的性质和光学性质, 结果表明电子和空穴的能量与量子点量子阱的结构密切相关, 随核半径和阱厚度的变化而

* 国家自然科学基金 (批准号: 10964005)、内蒙古高等学校科研基金 (批准号: NJzy08085) 资助的课题.

[†] E-mail: nmdzcl@163.com

变化; 且电子和空穴呈分离特征, 当阱厚度取某些特定值时, 量子点量子阱中的电子 - 空穴之间的光跃迁的振子强度有一个深谷, 这种特征与普通量子点不同. Chang 和 Lou^[29] 还研究了具有反转能带结构的 HgTe 异质结中的量子点的性质, 结果表明量子点带隙中的量子态是完全自旋极化态, 其边缘态呈环状密度分布, 并且是光学暗态. 若加上外磁场, 还可以观测到 Aharonv-Bohm 效应. 为简单起见, 本文仅限于研究一个球壳的量子点, 利用求解能量本征方程、LLP 么正变换和变分相结合的方法研究球壳量子点中极化子和量子比特的声子效应.

2 理论计算

设电子在内径为 r_1 、外径为 r_2 的球壳中运动, 在有效质量近似下, 电子 - 声子体系的哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(r) + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\text{LO}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} (V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{q}} + \text{h.c.}), \quad (1)$$

其中 $b_{\mathbf{q}}^{\dagger} (b_{\mathbf{q}})$ 为波矢为 $\mathbf{q}$ 的体纵光学声子的产生 (湮灭) 算符, $\mathbf{r}$ 为电子的坐标, 且

$$V(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} 0 & (r_1 \leq r \leq r_2, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi), \\ \infty & \text{其他区域}, \end{cases} \quad (2)$$

$$V_{\mathbf{q}} = i \left(\frac{\hbar\omega_{\text{LO}}}{q} \right) \left(\frac{\hbar}{2m^*\omega_{\text{LO}}} \right)^{1/4} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2}, \quad (3)$$

$$\alpha = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{\text{LO}}} \right) \left(\frac{2m^*\omega_{\text{LO}}}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right). \quad (4)$$

对哈密顿量做么正变换

$$U = \exp \left[\sum_{\mathbf{q}} (f_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} - f_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}) \right], \quad (5)$$

其中 $f_{\mathbf{q}}$ 是变分函数, 则

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(r) + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\text{LO}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + f_{\mathbf{q}}^{\bullet})(b_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}}) + \sum_{\mathbf{q}} [V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (b_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}}) + \text{h.c.}], \quad (6)$$

求解能量本征方程, 得量子点中电子的本征函数为

$$\psi_{n_r l m} = \begin{cases} C_{n_r l} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} [\mathbf{n}_l(kr_1) \mathbf{j}_l(kr) - \mathbf{j}_l(kr_2) \mathbf{n}_l(kr)] \\ \times P_l^{|m|}(\cos \theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, & (r_1 \leq r \leq r_2, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi), \\ 0 & \text{其他区域}, \end{cases} \quad (7)$$

其中 $C_{n_r l}$ 为归一化常数, $\mathbf{j}_l(x)$ 为 l 阶球贝塞尔函数, $\mathbf{n}_l(x)$ 为 l 阶球诺依曼函数, $P_l^{|m|}(\cos \theta)$ 为 l 阶连带勒让德函数.

电子 - 声子系 (极化子) 的基态波函数为

$$\Psi_0 = \psi_{000}|0\rangle, \quad (8)$$

其中 $|0\rangle$ 为无微扰零声子态, 满足 $b_{\mathbf{q}}|0\rangle = 0$, 则体系的基态能量为

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle. \quad (9)$$

体系的一个激发态波函数为

$$\Psi_1 = \psi_{020}|0\rangle, \quad (10)$$

相应的激发态能量为

$$E_1 = \langle \Psi_1 | H' | \Psi_1 \rangle, \quad (11)$$

以 Ψ_0 和 Ψ_1 二能态构造一个量子比特

$$\Phi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_0 + \Psi_1], \quad (12)$$

其随时间演化的规律为

$$\Phi(r, \theta, \varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_0 \exp \left(-\frac{iE_0 t}{\hbar} \right) + \Psi_1 \exp \left(-\frac{iE_1 t}{\hbar} \right) \right], \quad (13)$$

则量子比特内电子的概率密度分布为

$$Q = |\Phi(r, \theta, \varphi, t)|^2. \quad (14)$$

它随时间做周期性振荡, 振荡周期为

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_1 - E_0}. \quad (15)$$

3 数值计算和结果讨论

为研究声子对极化子和量子比特性质的影响, 选取极化子单位 $\hbar = 2m^* = \omega_{LO} = 1$ 进行数值计算, 数值结果绘于图 1 至图 5 中.

图 1 描绘了内径 $r_1 = 5$ 时基态能量随球壳外径的变化关系. 由图可以看出, 电子基态能量 E 和极化子 (电子 - 声子系) 基态能量 E' 均随外径 r_2 的增大而减小, 说明球壳量子点具有明显的量子尺寸效应; 且外径给定时, 极化子的能量比电子的能量低, 说明声子效应使基态能量减小, 且外径越大声子效应越明显. 由插图也可以看出, 电子和极化子激发态能量 E_1 、 E'_1 的演化规律及声子效应与基态一致. 当外径给定, 内径减小时, 电子或极化子的能量以及不同能态的能量差的变化规律与内径不变而外径增大的规律相同. 这与普通量子点的能谱类似, 与量子点量子阱结构中的电子能量状态不同, 量子点量子阱中的电子基态能量与量子点半径无关, 与阱厚度密切相关; 激发态能量与量子点半径及量子阱厚度均有关, 且具有不同角动量的电子和空穴的能级交叉、具有相同角动量的能级反交叉 [27].

图 2 描绘了内径 $r_1 = 5$ 时量子比特的振荡周期随球壳外径的变化规律. 可见考虑声子效应的量子比特的振荡周期 T' 较不考虑声子效应的量子比特的振荡周期 T 小, 且内径给定时, T' 、 T 以及 T' 、 T 两者之差均随外径 r_2 的增大而增大. 由 (15) 式可知, 量子比特的振荡周期与构造量子比特的两个态的能量差成反比, 借助图 1 可见, 随着球壳外半径的增大, 两个电子态的能量差增大, 导致振荡周期增大, 特别是考虑声子效应后, 声子效应导致极化子两态能量之差较电子两态能量之差大, 致使振荡周期 T' 比振荡周期 T 小, 且内径给定时, 随着外径 r_2 的增大, 量子尺寸效应减小、声子效应增强, 导致电子 (或极化子) 激发态和基态能量之差减小, 则振荡周期 T (或 T') 以及 T' 、 T 两者之差增大. 随着球壳外半径的增大, 极化子的能级间距会减小, 对构造量子比特的两个能态的选择带来一定困难. 但可以通过实验来控制量子点的大小或外加电磁场来改变能级间距, 从而得到满足构造量子比特要求的极化子能态.

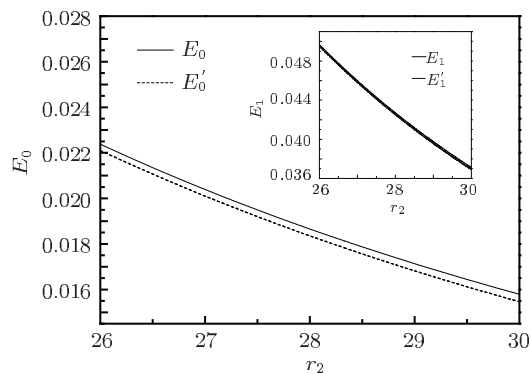


图 1 电子和极化子能量随外径的变化关系

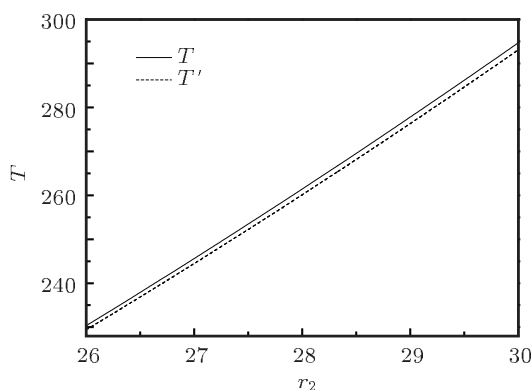


图 2 考虑与不考虑声子效应时振荡周期随外径的变化关系

图 3 描绘了内径 $r_1 = 5$ 、外径 $r_2 = 30$ 的球壳内, 在不同时刻 $\theta = 0$ 方向上概率密度随半径的变化关系. 图中 $Q'_{t=0.75T}$ 、 $Q_{t=0.75T}$ 与 $Q'_{t=T}$ 、 $Q_{t=T}$ 分别表示 $t = 0.75T$ 时刻或 $t = T$ 时刻考虑和不考虑声子效应时的概率密度. 可以看出, 概率密度随半径的变化而变化, 在球壳中心球面上概率密度幅值最大, 在球壳界面处概率密度为零, 其他空间点概率密度幅值介于最大和零之间. 结合 (13)—(15) 式可知, 各个空间点的概率密度均随时间做周期性振荡, 声子效应不改变各个空间点概率密度的幅值, 只减小概率密度的振荡周期, 这点也可以由图 3 得到说明. 如图, 当不考虑声子效应时, 在 $t = 0.75T$ 时刻, 量子比特内各个空间点的概率密度 $Q_{t=0.75T}$ 相对较小, 在 $t = T$ 时刻, 各个空间点的概率密度 $Q_{t=T}$ 达到最大幅值; 当考虑声子效应时, $t = 0.75T$ 时刻的概率密度 $Q'_{t=0.75T}$ 同样小于 $t = T$ 时刻的概率密度 $Q'_{t=T}$; 且 $Q_{t=0.75T} < Q'_{t=0.75T}$, $Q'_{t=T} < Q_{t=T}$, 结合图 2 知, 因为 $T' < T$, 则在 $t = 0.75T$ 时刻, $Q'_{t=0.75T}$ 较 $Q_{t=0.75T}$ 更快地趋于概率密度幅值, 而在 $t = T$

时刻, $Q'_{t=T}$ 已经离开概率密度幅值, 但 $Q_{t=T}$ 刚刚达到概率密度幅值.

图 4 描绘在内径 $r_1 = 5$ 、外径 $r_2 = 30$ 的球壳内, 半径 $r = 17.5$ 的球面上不同 θ 方向上的概率密度随时间的变化关系. 图中 $Q'_{\theta=0}$, $Q_{\theta=0}$ 与 $Q'_{\theta=\pi/2}$, $Q_{\theta=\pi/2}$ 分别表示 $\theta = 0$ 方向或 $\theta = \pi/2$ 方向考虑和没考虑声子效应时的概率密度随时间变化的关系. 由图中 $Q_{\theta=0}$, $Q'_{\theta=0}$ 曲线或 $Q_{\theta=\pi/2}$, $Q'_{\theta=\pi/2}$ 曲线可以看出, 给定空间点的概率密度随时间做周期性振荡, 声子效应虽然减小了振荡周期, 但不改变概率密度幅值. 而比较 $Q_{\theta=0}$, $Q_{\theta=\pi/2}$ 曲线或比较 $Q'_{\theta=0}$, $Q'_{\theta=\pi/2}$ 曲线还可以看出, 给定时刻, 同一球面上的概率密度随方位角 θ 的变化而变化.

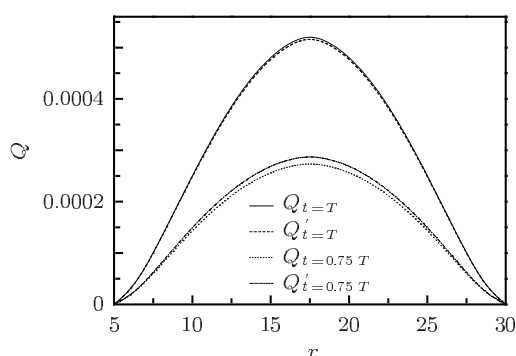


图 3 考虑与不考虑声子效应时概率密度随半径的变化关系

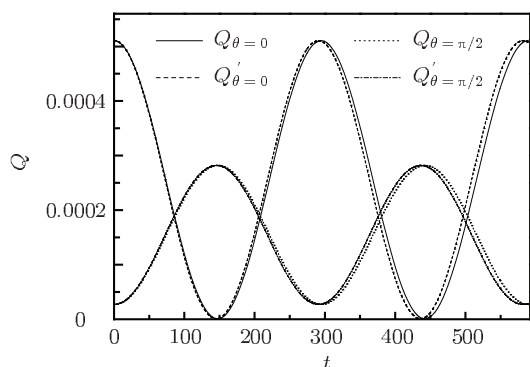


图 4 考虑与不考虑声子效应时概率密度随时间的变化关系

图 5 描绘了内径 $r_1 = 5$ 、外径 $r_2 = 30$ 的球壳内, 在 $t = 0.75T$ 和 $t = T$ 时刻, 半径 $r = 17.5$ 的球面上各空间点的概率密度随方位角 θ 的变化关系. 由图可见, 考虑和考虑声子效应时的概率

密度 $Q'_{t=0.75T}$, $Q_{t=0.75T}$ 与 $Q'_{t=T}$, $Q_{t=T}$ 均随方位角 θ 的变化而变化, 如图, 在 $t = T$ 时刻, 概率密度 $Q_{t=T}$ 在 $\theta = 0$ 和 π 方向最大, 在 $\theta = \pi/2$ 方向最大, 在 $Q'_{t=T}$ 的变化规律与之相同, 只是概率密度值稍小, 原因是 $T' < T$, 概率密度没有达到幅值. $t = 0.75T$ 时刻的概率密度分布与 $t = T$ 类似, 只是概率密度 $Q'_{t=0.75T}$ 较概率密度 $Q_{t=0.75T}$ 大, 且 $\theta = \pi/2$ 方向不是概率密度最小处. 结合图 4 还可知, 不同方向的概率密度幅值不同, 但均随时间做周期性振荡, 由于声子效应, 概率密度 Q' 比概率密度 Q 振荡的快.

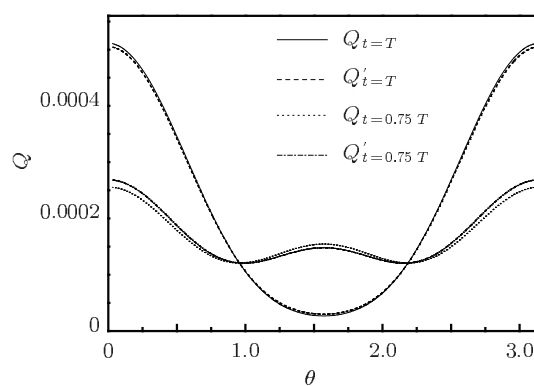


图 5 考虑和考虑声子效应时概率密度随方位角的变化关系

4 结论

应用求解能量本征方程、LLP 幺正变换、变分相结合的方法研究球壳量子点中极化子和量子比特的声子效应. 结果表明: 内径给定时, 随着外径的增大, 电子 - 声子之间相互作用增强, 声子效应不仅使极化子的基态 (或激发态) 能量小于电子的基态 (或激发态) 能量, 且使得极化子激发态与基态的能量差增大、量子比特的振荡周期减小, 且外径越大声子效应对极化子能态和量子比特振荡周期的影响越大; 但是声子效应不改变量子比特内电子概率密度分布的幅值, 各个空间点的概率密度幅值随半径和方位角的变化而变化, 中心球面处概率密度幅值最大, 界面处概率密度为零, 其他空间点的概率密度幅值介于最大和零之间, 且均随时间做周期性振荡.

- [1] Feynman R P 1982 *Int. J. Theor. Phys.* **21** 467
- [2] Feynman R P 1986 *Foundations of Physics* **16** 507
- [3] Pellizzari T, Gardiner S A, Cirac J I, Zoller P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3788
- [4] Cirac J I, Zoller P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4091
- [5] Gershenfeld N A, Chuang I L 1997 *Science* **275** 350
- [6] Nakamura Y, Pashkin Y A, Tsai J S 1999 *Nature* **398** 786
- [7] Li S S, Long G L, Bai F S, Zheng H Z 2001 *Proc. Nat. Acad. Sci.* **98** 11847
- [8] Li X Q, Yan Y J 2002 *Phys. Rev. B* **65** 205301
- [9] Gao K Y, Zhao C L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4446 (in Chinese) [高宽云, 赵翠兰 2008 物理学报 **57** 4446]
- [10] Cong Y C, Zhao C L 2009 *Research & Progress of Solid State Electronic* **29** 538 (in Chinese) [从银川, 赵翠兰 2009 固体电子学研究进展 **29** 538]
- [11] Zhang Y F, Jia J F, Han T Z, Tang Z, Shen Q T, Guo Y, Xue Q K 2005 *Chin. Phys.* **14** 1910
- [12] Liu X J, Gao K, Li Y, Wei J H, Xie S J 2007 *Chin. Phys.* **16** 2091
- [13] Oliveira B P W, Haas S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 155102
- [14] Stauber T, Vasilevskiy M I 2009 *Phys. Rev. B* **79** 113301
- [15] Harouni M B, Roknizadeh R, Naderi M H 2009 *Phys. Rev. B* **79** 165304
- [16] Zhao C L, Xiao J L 2010 *J. Low. Temp. Phys.* **160** 209
- [17] Xiao J L, Zhao C L 2011 *Superlatt. Microstruct.* **49** 9
- [18] Xiao J L, Ding Z H 2011 *J. Low. Temp. Phys.* **163** 302
- [19] Ding Z H, Xiao J L 2011 *Chin. Phys. B* **20** 097104
- [20] Jiang F S, Zhao C L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6786 (in Chinese) [姜福仕, 赵翠兰 2009 物理学报 **58** 6786]
- [21] Zhao C L, Gao K Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4857 (in Chinese) [赵翠兰, 高宽云 2010 物理学报 **59** 4857]
- [22] Mews A, Eychmüller A, Giersig M, Schooss D, Weller H 1994 *J. Phys. Chem.* **98** 934
- [23] Eychmüller A, Mews A, Weller H 1993 *Chem. Phys. Lett.* **208** 59
- [24] Eychmüller A, Vossmeier T, Mews A, Weller H 1994 *J. Lumin.* **58** 223
- [25] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [26] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [27] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [28] Chang K, Xiao J B 1998 *Phys. Rev. B* **57** 9780
- [29] Chang K, Lou W K 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 206802

The phonon effect of polaron and qubit in spherical shell quantum dot *

Zhao Cui-Lan[†] Cong Yin-Chuan

(College of Physics and Electronic Information, Inner Mongolia University for Nationalities, Tongliao 028043, China)

(Received 13 February 2012; revised manuscript received 15 March 2012)

Abstract

The influence of phonon on the properties of polaron and qubit in spherical shell quantum dot is studied by solving accurately the time-independent Schrödinger equation, Lee-Low-Pines unitary transformation and variation methods. The numerical results indicate that phonon effect leads to a lower energy of ground (or excited) state of polaron than electronic energy of ground (or excited) state and the increased oscillating period of a qubit, and the phonon effect becomes more obvious with outer radius increasing when inner radius is const. The numerical results also show that the phonon effect cannot influence the amplitude of probability density distribution of electrons in quantum bit, and that the probability density distribution of electrons is dependent on co-ordinate and time and its amplitude is maximal in centre spherical surface and but zero in boundary surface. The probability density of electrons at each position oscillates periodically with time.

Keywords: spherical shell quantum dot, polaron, qubit, probability density

PACS: 63.20.kd, 71.38.-k

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10964005), the Science Research Foundation of Institution of Higher Education of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant No. NJzy08085).

[†] E-mail: nmdzcl@163.com