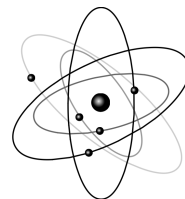




Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie
AGH Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej



Badanie wpływu potencjału uwięzienia i zewnętrznego pola elektrycznego na oddziaływanie wymienne w sprzężonych kropkach kwantowych

Artur Kwaśniowski

Rozprawa doktorska wykonana w
Katedrze Informatyki Stosowanej i Fizyki Komputerowej
pod kierunkiem
prof. dr hab. Janusza Adamowskiego

Kraków 2009

Chciałbym podziękować Panu Profesorowi Januszowi Adamowskiemu za sprawowanie opieki naukowej i liczne dyskusje. Dziękuję dr hab. inż. Bartłomiejowi Szafranowi za cenne i owocne uwagi oraz dr inż. Tomaszowi Chwiejowi za pomoc przy implementacji metody numerycznej. Podziękowania kieruję także do wszystkich pracowników Zespołu Teorii Nanostruktur i Nanourządzeń za wytworzenie przyjemnej atmosfery sprzyjającej pracy naukowej. Praca ta została częściowo sfinansowana z grantu promotorskiego nr N N 202 173835.

Rodzicom

Spis treści

1	Wprowadzenie	1
2	Model teoretyczny	6
3	Wpływ kształtu potencjału uwięzienia na oddziaływanie wymienne	12
4	Sterowanie oddziaływaniem wymiennym za pomocą pola elektrycznego	27
5	Oddziaływanie wymienne w trójwymiarowym modelu sprzężonych kropek w drucie kwantowym	50
6	Bramka logiczna XOR na spinach elektronów	58
7	Dyskusja	72
8	Podsumowanie	76
A	Metoda numeryczna	79
	Bibliografia	84

Rozdział 1

Wprowadzenie

1.1 Oddziaływanie wymienne w sprzężonych kropkach kwantowych – teoria i eksperyment

Oddziaływanie wymienne jest jednym z najbardziej charakterystycznych efektów kwantowych w układach wieloelektronowych. W naturalnych atomach i molekułach prowadzi ono do rozszczepienia poziomów energetycznych stanów singletowych i trypletowych oraz odpowiada za wiązanie atomów w molekuły. W ciałach stałych oddziaływanie wymienne wnosi główny wkład do wiązania kowalencyjnego półprzewodników oraz decyduje o magnetycznych właściwościach materiałów. W przypadku braku zewnętrznych pól (elektrycznego i magnetycznego), oddziaływanie wymienne pomiędzy elektronami w naturalnych układach atomowych jest określone poprzez rozkład elektronów oraz liczbę jąder i dla danego atomu lub molekuły jest stałe. Natomiast w kropkach kwantowych można kontrolować (zmieniać) oddziaływanie wymienne. Pojedyncze i sprzężone kropki kwantowe, wytwarzane przez człowieka odpowiedniki naturalnych atomów i molekuł, nazywane są często sztucznymi atomami i sztucznymi molekułami. Są to układy o rozmiarach rzędu nanometrów. Mogą mieć one różne kształty i rozmiary. Można także zmieniać zasięg i głębokość potencjału uwięzienia elektronów. Daje to możliwość, niespotykaną w przypadku układów naturalnych, projektowania układów o odpowiednich do zastosowań poziomach energetycznych i do sterowania oddziaływaniem wymiennym.

Oddziaływanie wymienne pomiędzy elektronami w kropkach kwantowych

może stanowić wydajny mechanizm do wykonywania operacji logicznych na kubitach spinowych [1, 2]. Mechanizm ten wydaje się być bardzo obiecujący w zastosowaniu do kwantowego przetwarzania informacji w nanourządzeniach półprzewodnikowych. Elzerman *et al.* [3, 4] zbadali układ sprzężonych bocznie elektrostatycznych kropek kwantowych, w których można kontrolować liczbę elektronów w każdej kropce kwantowej. Eksperymenty te pokazują, że układy sprzężonych bocznie elektrostatycznych kropek kwantowych stanowią dobry punkt startowy w realizacji skalowalnych komputerów kwantowych opartych na spinie elektronów.

Badanie oddziaływania wymiennego w nanourządzeniach zbudowanych z kropek kwantowych pozwala na opracowanie mechanizmów kontrolowania i sterowania oddziaływaniem wymiennym, co w rezultacie prowadzi do kontrolowanego manipulowania kubitami spinowymi [1, 2, 5, 6]. Operacja obrotu spinów pod wpływem oddziaływania wymiennego w sprzężonych kropkach kwantowych, została niedawno zasymulowana poprzez bezpośrednie rozwiązanie zależnego od czasu równania Schrödingera [7]. Petta *et al.* [6] demonstrowali spójną manipulację spinami elektronów w sprzężonych kropkach kwantowych. W eksperymencie tym, wykorzystującym elektryczne sterowanie oddziaływaniem wymiennym, zrealizowano przygotowanie zadanego stanu początkowego, ewolucję układu oraz odczyt stanu końcowego. Taylor *et al.* [8] przedstawili teoretyczny model dynamiki spinu w dwuelektronowych sprzężonych kropkach kwantowych z analizą wyników otrzymanych w poprzednim eksperymencie [6]. Hayashi *et al.* [9] wykonali eksperymenty demonstrujące spójną manipulację kubitami spinowymi w sprzężonych bocznie kropkach kwantowych. Hatano *et al.* [10, 11] eksperymentalnie wyznaczyli wielkość sprzężenia tunelowego i wymiennego w sprzężonych bocznie pionowych kropkach kwantowych. Meunier *et al.* [12] wykonali nieniszczący pomiar spinu elektronów pozwalający rozróżnić stan singletowy i trypletowy w kropce kwantowej. Tarucha *et al.* [13] wyznaczyli wkład oddziaływania kulombowskiego i wymiennego do całkowitego oddziaływania pomiędzy elektronami w kropkach kwantowych. Laird *et al.* [14] zmierzili wpływ oddziaływania wymiennego na przejście singlet-tryplet w sprzężonych kropkach kwantowych. Kwantowe operacje logiczne mogą także być wykonywane w sprzężonych kropkach kwantowych wytworzonych w drutach kwantowych [15, 16].

Miarą oddziaływania wymiennego jest energia wymiany J zdefiniowana

jako

$$J = E_T - E_S , \quad (1.1)$$

gdzie E_T i E_S są odpowiednio najniższymi energiami stanów singletowego i trypletowego. W fizyce nanourządzeń opartych na materiałach półprzewodnikowych, energia wymiany (1.1) odgrywa podwójną rolę: (i) określa wielkość sprzężenia wymiennego (zgodnie z modelem Heisenberga), które może prowadzić do obrotu kubitów spinowych [1, 2, 5, 7], (ii) J może być traktowane jako rozszczepienie singlet-tryplet, co pozwala nam rozróżniać różne stany spinowe układów dwuelektronowych [6, 12].

W ciągu ostatnich lat układy sprzężonych kropek kwantowych oraz energia wymiany w tych układach były przedmiotem intensywnych badań teoretycznych. Wensauer *et al.* [17] wyznaczyli energię stanu podstawowego dla sprzężonych bocznie harmonicznym kropek kwantowych zawierających od dwóch do ośmiu elektronów. Rontani *et al.* [18] wyznaczyli widmo elektronowe dla sprzężonych pionowo kropek kwantowych w polu magnetycznym. Nagaraja *et al.* [19], Harju *et al.* [20] i Marlo *et al.* [21] zbadali właściwości elektronowe sprzężonych kropek kwantowych w polu magnetycznym. Hu *et al.* [22] wyznaczyli widmo poziomów energetycznych sprzężonych bocznie kropek gaussowskich oraz pokazali zależność energii wymiany od pola magnetycznego. Burkard *et al.* [2] i Popsueva *et al.* [23] wyznaczyli energię wymiany w funkcji pola elektrycznego i magnetycznego dla sprzężonych bocznie harmonicznym kropek kwantowych. Dla sprzężonych pionowo kropek kwantowych obliczenia energii wymiany w polu elektromagnetycznym wykonali Burkard *et al.* [5], Bellucci *et al.* [24] oraz Melnikov *et al.* [25]. Zewnętrzne pole magnetyczne przyłożone w kierunku prostopadłym do płaszczyzny, w której poruszają się elektrony, obniża energię stanu trypletowego, co prowadzi do zmniejszenia rozszczepienia singlet-tryplet. Asymetria kropek kwantowych powoduje zwiększenie oddziaływania wymiennego [26, 27]. Efekty rozmiarowe i ich wpływ na oddziaływanie wymienne zostały zbadane w pracach [28, 29, 30, 31]. Zwiększający się rozmiar układu sprzężonych kropek kwantowych prowadzi do zmniejszenia energii wymiany J [28, 29, 30]. Dla układu dwóch identycznych eliptycznych kropek kwantowych, Zhang *et al.* [27, 32] wyliczyli energię wymiany w funkcji parametru $r = R_y/R_x$, gdzie $R_x(R_y)$ jest zasięgiem potencjału uwięzienia w kierunku $x(y)$. Zhang *et al.* [33] pokazali, że niemonotoniczny przebieg energii wymiany jest skutkiem gwałtownych zmian w konfiguracji elektronowej stanu trypletowego.

Wpływ zewnętrznego pola elektrycznego na energię wymiany był badany w pracach [5, 34] dla sprzężonych pionowo samozorganizowanych kropek kwantowych. Burkard *et al.* [5] przyjęli harmoniczny potencjał uwięzienia i wyliczyli energię wymiany w sprzężonych pionowo kropkach kwantowych w polu elektrycznym używając metod Heitlera-Londona i Hunda-Mullikena. Wyniki te [5] obrazują monotoniczne zmniejszanie się energii wymiany wraz ze wzrostem pola elektrycznego. Pedersen *et al.* [28] policzyli energię wymiany dla harmonicznych sprzężonych kropek kwantowych używając dokładnych metod numerycznych i pokazali, że nawet w przypadku prostych układów przybliżenia Heitlera-Londona, Hunda-Mullikena i Hubbarda dają niedokładne wyniki. Mizel *et al.* [35] zbadali właściwości energii wymiany w potrójnych i poczwórnych harmonicznych kropkach kwantowych.

W elektrostatycznych kropkach kwantowych [3, 4], właściwości stanów energetycznych elektronów związanych w układzie mogą być modyfikowane poprzez przyłożenie zewnętrznych napięć do bramek, tzn. poprzez zmianę pola elektrycznego w nanoukładzie [36, 37, 38]. Typowe odległości pomiędzy poziomami energetycznymi w elektrostatycznych kropkach kwantowych są rzędu 0.1 – 2.0 meV, natomiast średnice takich kropek wynoszą od około 10 nm do ~ 500 nm [39, 40]. Do wytwarzania elektrostatycznych kropek kwantowych wykorzystuje się najczęściej materiały takie jak GaAs, InSb lub Si. Kontrola sprzężenia pomiędzy elektrostatycznymi kropkami kwantowymi została zbadana i zademonstrowana w eksperymentach dotyczących transportu elektronowego [40, 41, 42]. Ponadto pokazano, że liczba elektronów uwięzionych w pojedynczych [43] jak i w podwójnych [3, 44, 45] elektrostatycznych kropkach kwantowych wytworzonych w GaAs może być dokładnie kontrolowana.

Wysoka wiarygodność operacji na kubitach spinowych może być osiągnięta, jeśli oddziaływanie wymienne jest wystarczająco silne [7]. Prowadzi to do problemu takiego zaprojektowania nanourządzenia półprzewodnikowego, za pomocą którego można by było sterować oddziaływaniem wymiennym.

1.2 Cel i zakres badań

W tej rozprawie przedstawiono wyniki badań wpływ kształtu i zasięgu potencjału uwięzienia oraz zewnętrznego pola elektrycznego na energię wymiany w nanourządzeniach zawierających asymetryczne sprzężone boczenie kropki kwantowe. Głównym celem badań było zbadanie możliwości sterowania od-

działaniem wymiennym za pomocą zewnętrznego napięcia oraz optymalizacja parametrów nanourządzeń w celu otrzymania możliwie największej wartości energii wymiany. Ponadto podany został projekt nanourządzenia, które może realizować bramkę logiczną XOR.

Rozdział 2 zawiera opis modelu teoretycznego wykorzystywanego w obliczeniach. W rozdziale 3 omówiono wpływ kształtu potencjału uwięzienia na energię wymiany w sprzężonych bocznie kropkach kwantowych. W rozdziale 4 zbadano wpływ zewnętrznego pola elektrycznego na energię wymiany i możliwość sterowania oddziaływaniem wymiennym za pomocą tego pola. Rozdział 5 zawiera rozszerzenie obliczeń na układy sprzężonych kropek kwantowych w trójwymiarowym modelu drutu kwantowego. W rozdziale 6 przedstawiona została propozycja realizacji bramki logicznej XOR na spinach elektronów w oparciu o poczwórne kropki kwantowe. Rozdział 7 zawiera dyskusję otrzymanych wyników, rozdział 8 - podsumowanie, stosowane metody numeryczne zostały omówione w Dodatku.

Rozdział 2

Model teoretyczny

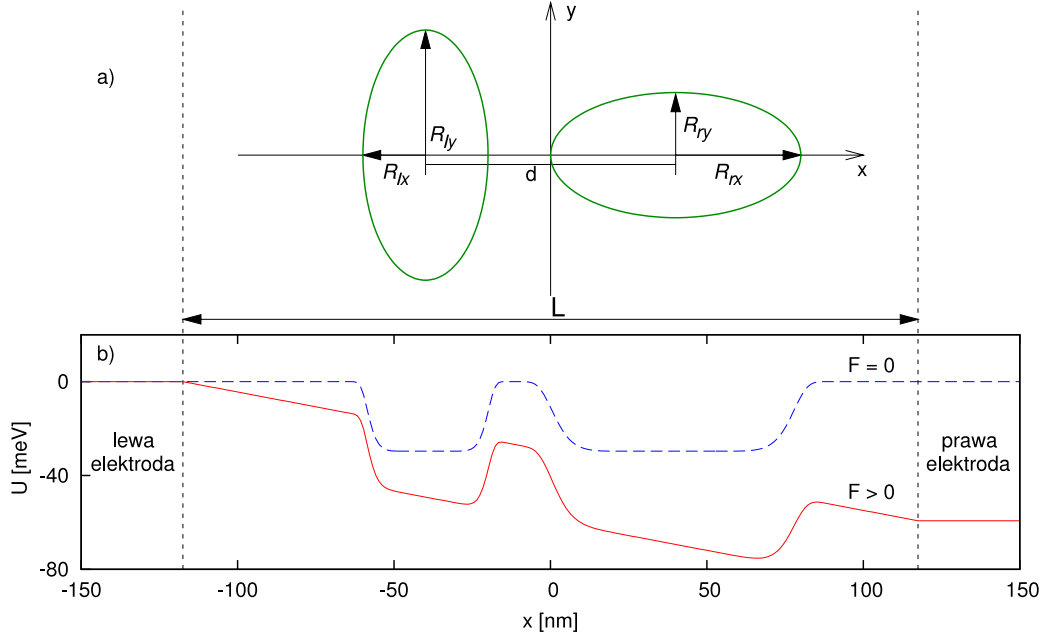
W tym rozdziale zostanie przedstawiony model teoretyczny wykorzystywany w obliczeniach. Wybrana metoda obliczeń pozwala uwzględnić realistyczny kształt potencjałów uwięzienia w sprzężonych bocznie kropkach kwantowych w modelu dwuwymiarowym. Zaletą tej metody jest możliwość jej prostego rozszerzenia na układy sprzężonych kropek kwantowych wytworzonych w drucie kwantowym [15] w modelu trójwymiarowym.

2.1 Układ dwuwymiarowy

Rozważony został układ dwóch elektronów uwięzionych w dwóch sprzężonych bocznie kropkach kwantowych umieszczonych pomiędzy dwoma elektrodami, które po przyłożeniu do nich napięcia, wytwarzają stałe pole elektryczne. Sprzężone bocznie kropki kwantowe wytwarzane są zazwyczaj w heterostrukturach zawierających dwuwymiarowy gaz elektronowy (2DEG) poprzez przyłożenie odpowiednich napięć do elektrod bramek, które są naniesione na powierzchni nanostruktury, poniżej której poruszają się elektrony [3, 4, 6]. Przyjęto, że energia potencjalna elektronu w pojedynczej kropce kwantowej dana jest dwuwymiarową funkcją potęgowo-eksponencjalną [46]

$$U_{\mu}(\mathbf{r}) = -U_{0\mu} \exp\{ -[(x - x_{0\mu})^2/R_{\mu x}^2 + (y - y_{0\mu})^2/R_{\mu y}^2]^{p/2} \} , \quad (2.1)$$

gdzie index μ rozróżnia położenie kropek kwantowych względem elektrod wytwarzających jednorodne pole elektryczne ($\mu = l$ dla lewej i $\mu = r$ dla prawej kropki), $U_{0\mu}$ to głębokość studni potencjału ($U_{0\mu} > 0$), $\mathbf{r} = (x, y)$,



Rysunek 2.1: (a) Schematyczny rysunek geometrii nanoukładu. (b) Profil energii potencjalnej U elektronu wzdłuż osi x dla $y = 0$ bez pola elektrycznego ($F = 0$) i z włączonym polem elektrycznym ($F > 0$). Pionowe linie przerywane pokazują brzozy elektrody lewej (l) i prawej (r). Parametry nanoukładu: $R_{lx} = R_{ry} = 20$ nm, $R_{ly} = R_{rx} = 40$ nm, $d = 80$ nm, $p = 10$, $V = 60$ mV (dla $F > 0$).

$\mathbf{r}_{0\mu} = (x_{0\mu}, y_{0\mu})$ jest wektorem położenia środka kropki kwantowej, a $R_{\mu x}$ i $R_{\mu y}$ są zasięgami potencjału uwięzienia w kierunkach x i y . Zasięgi te wyznaczają rozmiary przestrzenne kropek kwantowych. Parametr p ($p \geq 2$) określa twardość potencjału uwięzienia [47]. Dla $p = 2$ otrzymuje się miękkie potencjały gaussowskie, natomiast dla $p \geq 4$ można mówić o potencjale twardym. W szczególności dla $p \rightarrow \infty$ energia potencjalna (2.1) przybiera kształt prostokątnej studni potencjału. Parametryzacja energii potencjalnej w postaci wzoru (2.1) pozwala modelować kropki kwantowe o różnym kształcie i rozmiarach. Rysunek 2.1(a) pokazuje schemat geometrii nanoukładu zawierającego dwie sprzężone kropki kwantowe, a rysunek 2.1(b) prezentuje profil energii potencjalnej elektronu wzdłuż osi x .

Dla układu sprzężonych bocznie kropek kwantowych przyjmujemy potencjał uwięzienia w postaci sumy potencjałów (2.1)

$$U_{conf}(\mathbf{r}) = U_l(\mathbf{r}) + U_r(\mathbf{r}) . \quad (2.2)$$

Oś x skierowana jest wzdłuż prostej łączącej środki kropek kwantowych. Przyjmujemy $x_{0l} = -x_{0r}$ i $y_{0l} = y_{0r} = 0$.

Jeżeli do elektrod, oddalonych od siebie o odległość L , przyłożone zostanie napięcie elektryczne V , to w obszarze półprzewodnika zostanie wytworzone jednorodne pole elektryczne $\mathbf{F} = (-F, 0, 0)$, gdzie $F = V/L$. Pojedynczy elektron w polu elektrycznym $\mathbf{F}$ posiada dodatkową energię potencjalną $\Delta U(\mathbf{r})$ daną wzorem

$$\Delta U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < -L/2, \\ -eFx - eV/2 & \text{dla } |x| \leq L/2, \\ -eV & \text{dla } x > L/2. \end{cases} \quad (2.3)$$

Przyjęto, że energia potencjalna elektronu w lewej elektrodzie jest równa zeru. Wzór (2.3) opisuje rozkład przestrzenny pola elektrycznego o skończonym zasięgu, wytworzonego przez zewnętrzne napięcie V przyłożone między elektrodami lewą i prawą. W odróżnieniu od prac [34, 48], w których założony został nieskończony zasięg pola elektrycznego, w pracy [49] przyjęty został bardziej realistyczny rozkład przestrzenny pola elektrycznego (2.3), które działa w skończonym obszarze pomiędzy elektrodami. Wzór (2.3) określa profil energii potencjalnej elektronu w stacjonarnym jednorodnym polu elektrycznym wytworzonym w rzeczywistych nanourządzeniach poprzez stałe napięcie V przyłożone pomiędzy elektrodami. Całkowita energia potencjalna pojedynczego elektronu dana jest wzorem

$$U(\mathbf{r}) = U_{conf}(\mathbf{r}) + \Delta U(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

W przybliżeniu masy efektywnej hamiltonian układu dwóch elektronów ma postać

$$H = h_1 + h_2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s r_{12}}, \quad (2.5)$$

gdzie h_j ($j = 1, 2$) jest hamiltonianem jednoelektronowym, ϵ_0 jest przenikalnością elektryczną próżni, ϵ_s jest statyczną stałą dielektryczną, $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ jest odległością elektron-elektron, a $\mathbf{r}_j = (x_j, y_j)$ jest wektorem położenia elektronu. Hamiltonian jednoelektronowy ma postać

$$h_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_j^2 + U(\mathbf{r}_j), \quad (2.6)$$

gdzie m_e jest masą pasmową elektronu. Zakładamy, że masa efektywna i stała

dielektryczna nie zmieniają się w obrębie rozpatrywanego układu, co w dobrym przybliżeniu zachodzi w przypadku elektrostatycznych kropek kwantowych [36, 37].

W wyniku rozwiązania problemu jednoelektronowego z hamiltonianem (2.6) otrzymuje się energie własne E_ν i odpowiadające im funkcje własne $\varphi_\nu(x, y)$. Szczegółowy opis zastosowanej metody numerycznej przedstawiono w Dodatku A. Otrzymane energie i funkcje własne zostały użyte do rozwiązania problemu dwuelektronowego (2.5) za pomocą metody mieszania konfiguracji [18].

Dołączając do jednoelektronowych funkcji falowych funkcje własne χ_σ z -owej składowej spinu elektronu otrzymano spinorbitale $\phi_{\nu\sigma}(x, y)$. Ze spinorbitali $\phi_{\nu\sigma}(x, y)$ utworzone zostały wyznaczniki Slatera

$$\Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_{\nu_1\sigma_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\nu_2\sigma_2}(\mathbf{r}_2) - \phi_{\nu_2\sigma_2}(\mathbf{r}_1)\phi_{\nu_1\sigma_1}(\mathbf{r}_2) \right], \quad (2.7)$$

gdzie $n = (\nu_1, \sigma_1, \nu_2, \sigma_2)$ numeruje różne konfiguracje dwuelektronowe. Wyznaczniki Slatera $\Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ wykorzystane zostały do utworzenia dwuelektronowej funkcji falowej $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ w postaci liniowej kombinacji wyznaczników Slatera

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.8)$$

W wyniku rozwiązania problemu dwuelektronowego otrzymuje się energie i funkcje własne stanów singletowego E_S ($S = 0$) i trypletowego E_T ($S = 1$). Następnie została obliczona energia wymiany J zgodnie ze wzorem (1.1):

$$J = E_T - E_S,$$

gdzie E_T i E_S są najniższymi energiami stanów singletowego i trypletowego.

W celu zobrazowania zmian lokalizacji elektronów zachodzących w badanych układach wyznaczona została jednoelektronowa gęstość prawdopodobieństwa zdefiniowana jako

$$\varrho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^2 \langle \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle. \quad (2.9)$$

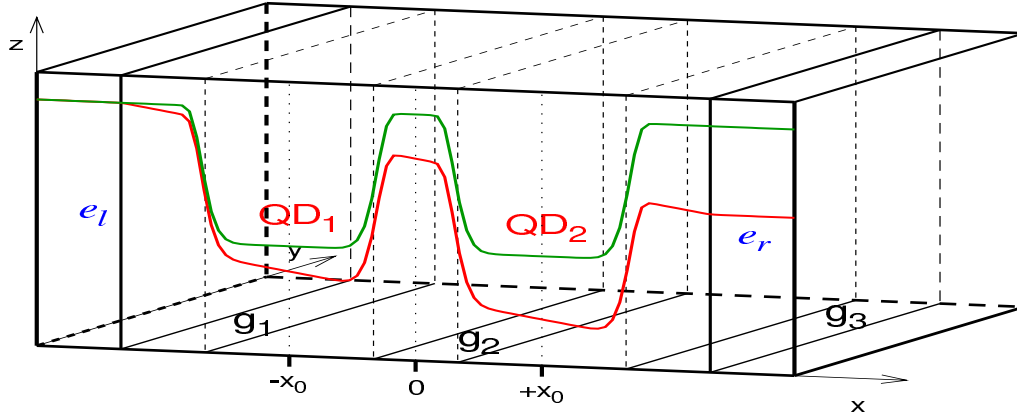
$\varrho(\mathbf{r})$ jest wartością oczekiwaną operatora gęstości elektronowej.

2.2 Układ trójwymiarowy

W rozprawie niniejszej rozważano również układ dwóch elektronów uwięzionych w sprzężonych kropkach kwantowych wytworzonych w drutach kwantowych [15, 50]. Drut kwantowy wytworzony z InAs umieszczony jest na siatce elektrod, których napięcia można niezależnie zmieniać. Rysunek 2.2 przedstawia schemat rozważanego układu. Oś drutu zgodna jest z kierunkiem osi x układu współrzędnych. Potencjał uwięzienia wzdłuż osi drutu wytwarzany jest elektrostatycznie poprzez przyłożenie ujemnych napięć do elektrod bramek g_1 , g_2 oraz g_3 . Odległość pomiędzy kolejnymi bramkami wynosi ~ 60 nm, a szerokość bramek ~ 30 nm. Powstaje zatem układ sprzężonych kropek kwantowych QD_1 i QD_2 . W zależności od metody wytwarzania drutów kwantowych (wytrawianie, epitaksja), otrzymuje się druty kwantowe o różnym przekroju poprzecznym. Elektrody e_l i e_r , do których przyłożone jest napięcie V , są źródłem zewnętrznego pola elektrycznego $\mathbf{F}$.

Kształt potencjału uwięzienia wzdłuż osi x może być opisany za pomocą funkcji pomocniczej $f_{\parallel}(x)$, będącej sumą dwóch funkcji potęgowo-eksponencjalnych [49]

$$f_{\parallel}(x) = \exp\{ -[(x + x_0)^2 / R_{lx}^2]^{p_{\parallel}/2} \} +$$



Rysunek 2.2: Model sprzężonych kropek kwantowych w drucie kwantowym. Elektrody g_1 , g_2 i g_3 wytwarzają potencjał uwięzienia wzdłuż osi drutu. Napięcie przyłożone do elektrod e_l i e_r wytwarza pole elektryczne $\mathbf{F}$ w obszarze pomiędzy elektrodami. Krzywa zielona pokazuje energię potencjalną elektronu dla $y = z = 0$ wzdłuż osi x bez pola, a krzywa czerwona w polu elektrycznym $\mathbf{F}$.

$$+ \exp\{-(x-x_0)^2/R_{rx}^2\}^{p_{\parallel}/2} \}, \quad (2.10)$$

gdzie R_{lx} (R_{rx}) jest zasięgiem potencjału uwięzienia lewej (prawej) kropki kwantowej. Parametr $p_{\parallel}$ ($p_{\parallel} \geq 2$) określa twardość potencjału uwięzienia [47] działającego wzdłuż osi drutu. Kształt potencjału uwięzienia poprzecznego został opisany przy użyciu odpowiedniej kombinacji funkcji eksponencjalno-potęgowych w taki sposób, aby zapewnić odpowiedni kształt potencjału uwięzienia w przekroju poprzecznym (y, z) , np. dla drutu o kwadratowym przekroju poprzecznym przyjęto

$$f_{\perp}(y, z) = \exp\{-(y^2/R_y^2)^{p_{\perp}/2} - (z^2/R_z^2)^{p_{\perp}/2}\}, \quad (2.11)$$

gdzie R_y (R_z) jest zasięgiem potencjału uwięzienia w kierunku y (z). Parametr $p_{\perp}$ ($p_{\perp} \geq 2$) określa twardość potencjału uwięzienia poprzecznego. Taka parametryzacja pozwala zapisać wypadkowy potencjał uwięzienia w postaci iloczynu

$$U_{conf}^{3D}(x, y, z) = -U_0 f_{\parallel}(x) f_{\perp}(y, z), \quad (2.12)$$

gdzie U_0 jest głębokością studni potencjału uwięzienia.

W prezentowanym modelu założono, że elektrony znajdują się w zewnętrznym jednorodnym polu elektrycznym $\mathbf{F} = (-F, 0, 0)$, wytworzonym przez napięcie V przyłożone pomiędzy elektrodami e_l i e_r oddalonymi od siebie o odległość L . Każdy z elektronów posiada zatem dodatkową energię potencjalną daną wzorem (2.3). Zatem całkowita energia potencjalna elektronu w modelu 3D określona jest wzorem

$$U_{3D}(\mathbf{r}) = U_{conf}^{3D}(x, y, z) + \Delta U(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

Problem jednoelektronowy z energią potencjalną daną wzorem (2.13), a następnie problem dwuelektronowy (2.5) rozwiązano według schematu obliczeń zaprezentowanego dla przypadku 2D, uogólnionego do układów trójwymiarowych.

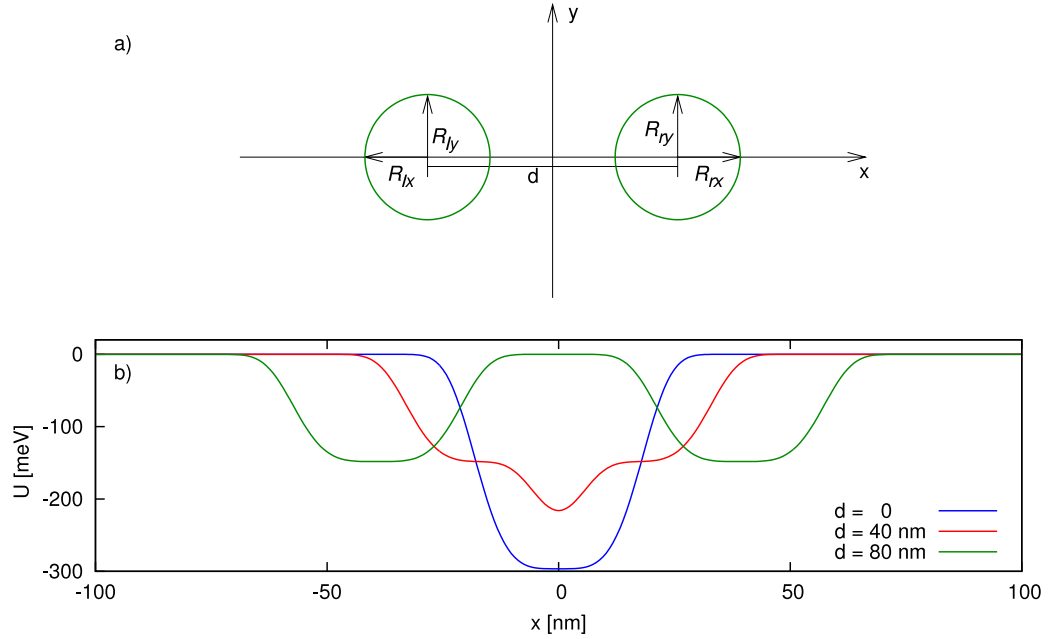
Rozdział 3

Wpływ kształtu potencjału uwięzienia na oddziaływanie wymienne

W rozdziale tym dokonano analizy wpływu, jaki ma kształt potencjału uwięzienia na energię wymiany w układzie sprzężonych bocznie kropek kwantowych. Wyniki te zostały opublikowane w artykule [30]. Potencjał uwięzienia sparametryzowany został za pomocą funkcji potęgowo-eksponencjalnych (2.1) o centrach w środkach kropek kwantowych o symetrii kołowej. Wykonano obliczenia energii wymiany J w funkcji odległości d pomiędzy środkami kropek kwantowych dla potencjałów uwięzienia o różnych parametrach twardości: od $p = 2$ do $p = 100$. Dla wybranych głębokości studni potencjału $U_0 = 60$ meV, 150 meV i 295 meV wyznaczona została energia wymiany J dla kołowych kropek kwantowych o średnicy od 20 do 60 nm.

3.1 Schemat układu

Schemat geometrii rozważanego układu jest pokazany na rysunku 3.1(a). Rysunek 3.1(b) prezentuje profil potencjału uwięzienia wzdłuż osi łączącej środki kropek dla trzech wybranych odległości pomiędzy środkami potencjału uwięzienia. Każda kropka kwantowa została opisana dwuwymiarową funkcją potęgowo-eksponencjalną (2.1) o symetrii obrotowej. Rysunek 3.2 prezentuje kształt potencjału uwięzienia w funkcji x dla $y = 0$ o różnej twardości p dla różnych odległości pomiędzy centrami potencjału uwięzienia. Dla $d = 0$

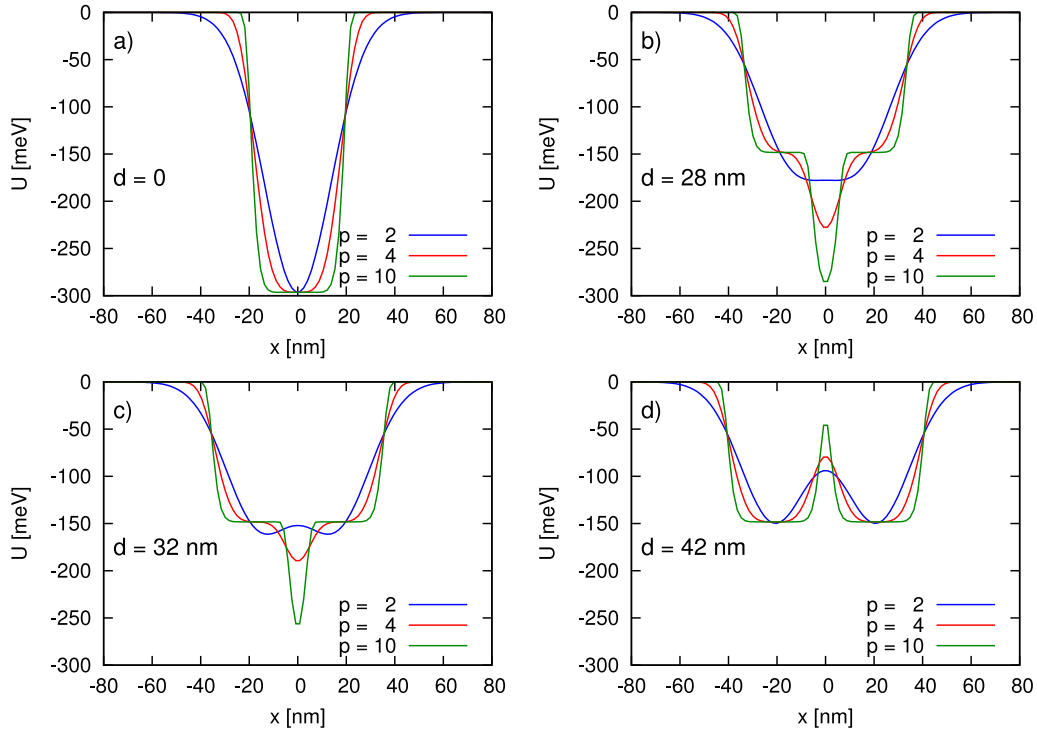


Rysunek 3.1: (a) Schemat geometrii układu sprzężonych kropek kwantowych o symetrii kołowej. (b) Profil potencjału uwięzienia $U(x, y = 0)$ wzdłuż osi łączącej środki kropek kwantowych dla różnych odległości pomiędzy centrami potencjału uwięzienia dla ustalonego $p = 4$.

mamy do czynienia z pojedynczą kropką kwantową o podwójnej głębokości studni potencjału ($2U_0$), natomiast dla dużych odległości d układ złożony jest z dwóch nieoddziałujących ze sobą kropek kwantowych o głębokości U_0 [por. rys. 3.2(a) oraz rys. 3.2(d)]. Dla pośrednich d , superpozycja potencjałów „twardych” prowadzi do powstania złożonego kształtu potencjału uwięzienia, gdzie głęboka i wąska studnia kwantowa otoczona jest szerszą i płytszą studnią kwantową [por. rys. 3.2(b) oraz rys. 3.2(c)].

3.2 Wyniki

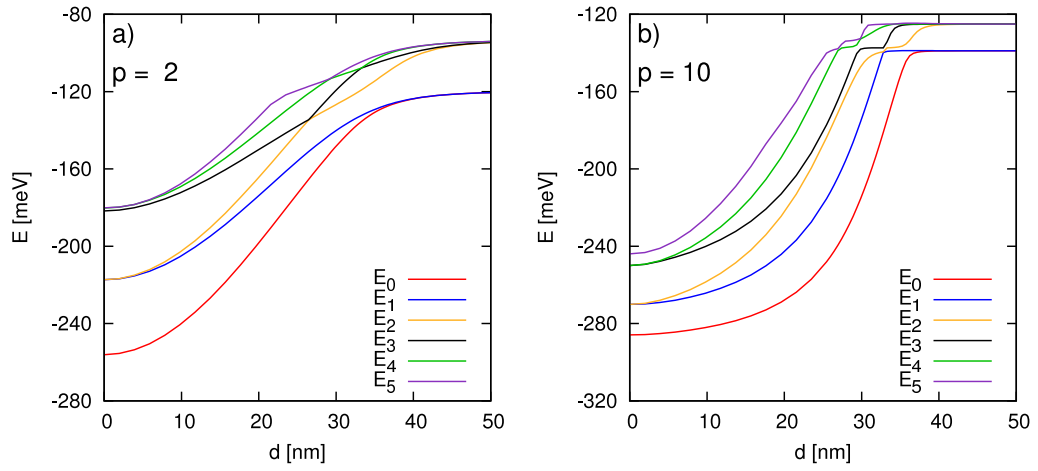
Obliczenia zostały wykonane dla układu dwóch identycznych kropek kwantowych, czyli dla $R_{\mu x} = R_{\mu y} = R$. Problem własny (2.6) rozwiązany został metodą czasu urojonego [51] poprzez dyskretyzację hamiltonianu (2.6) na dwuwymiarowej siatce przestrzennej zawierającej 101×101 punktów.



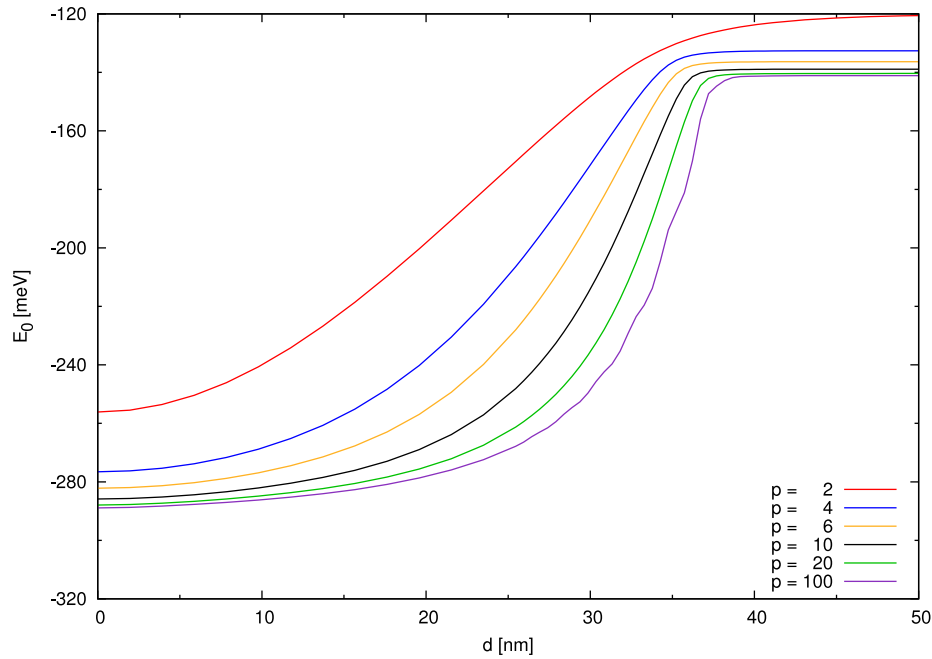
Rysunek 3.2: Energia potencjalna U elektronu w funkcji x dla $y = 0$ oraz dla różnych odległości d pomiędzy centrami potencjału uwięzienia i różnych p .

3.2.1 Problem jednoelektronowy

Rysunek 3.3 pokazuje energie sześciu najniższych poziomów energetycznych dla przypadku (a) potencjału miękkiego ($p = 2$) i (b) potencjału twardego ($p = 10$). Stany o tych energiach były używane do rozwiązania problemu dwuelektronowego (2.5). Poziomy jednoelektronowe są monotonicznie rosnącymi funkcjami odległości pomiędzy centrami potencjału uwięzienia. Dla $d = 0$ energie stanów wzbudzonych są zdegenerowane. Degeneracja ta jest zniesiona dla $d > 0$. Dla dużych d otrzymujemy tylko dwa zdegenerowane poziomy energetyczne odpowiadające poziomom energetycznym elektronu w pojedynczej kropce kwantowej. Rysunek 3.4 przedstawia zależność energii stanu podstawowego dla różnych wartości parametru p w funkcji odległości pomiędzy centrami potencjału uwięzienia. Wraz ze wzrostem twardości potencjału uwięzienia wzrasta również efektywny zasięg potencjału. Energia stanu podstawowego E_0 przyjmuje niższe wartości (por. rysunek 3.4) co oznacza, że elektron jest silniej związany w kropce kwantowej.



Rysunek 3.3: Najniższe jednoelektronowe poziomy energetyczne $E_0, \dots, E_5$ w podwójnej kropce kwantowej w funkcji odległości d pomiędzy środkami potencjału uwięzienia dla (a) potencjału miękkiego o $p = 2$ i (b) potencjału twardego o $p = 10$. Pozostałe parametry kropek: $R = 20$ nm, $U_0 = 150$ meV.

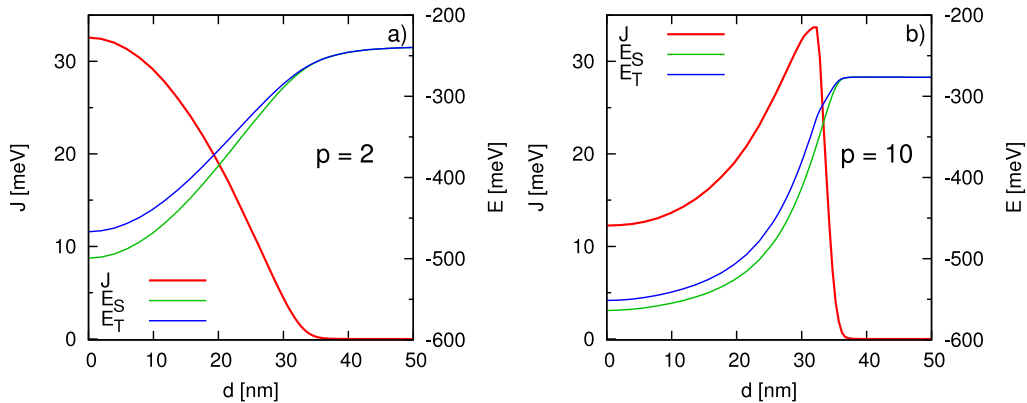


Rysunek 3.4: Energia stanu podstawowego E_0 elektronu w funkcji odległości d pomiędzy środkami kropek kwantowych dla różnej twardości p potencjału uwięzienia. Pozostałe parametry kropek: $R = 20$ nm, $U_0 = 150$ meV.

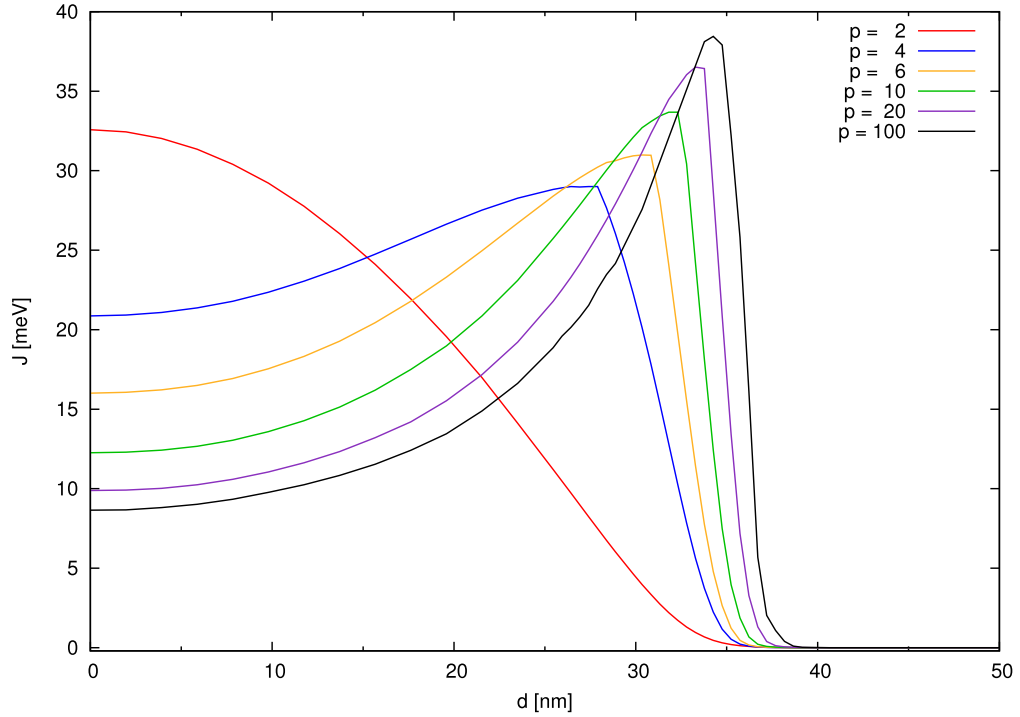
3.2.2 Problem dwuelektronowy

Dwa elektrony związane w sprzężonych kropkach kwantowych tworzą stany molekularne. W związku z tym układ sprzężonych kropek kwantowych nazywany jest sztuczną molekułą [18, 52]. Dwuelektronowy hamiltonian (2.5) zdiagonalizowany został w bazie (2.8). Na podstawie wykonanych obliczeń można stwierdzić, że konfiguracje zbudowane z jednoelektronowego stanu podstawowego z momentem pędu $l = 0$ mają największy wkład do dwuelektronowej funkcji falowej stanu singletowego ($c_0 \simeq 0.992$), natomiast konfiguracje z $l = 1$ dominują w przypadku stanu trypletowego ($c_1 \simeq 0.999$).

Rysunek 3.5 pokazuje obliczoną energię wymiany J oraz najniższe energie stanu singletowego E_S i trypletowego E_T dla potencjałów o różnej twardości. Energie E_S i E_T są monotonicznie rosnącymi funkcjami odległości d pomiędzy centrami potencjału uwięzienia. Rysunek 3.5 pokazuje, że zależność energii wymiany J od odległości d jest różna dla potencjałów o różnej twardości. Jeżeli potencjał uwięzienia jest miękki [por. rys. 3.5(a)], to J maleje wraz ze wzrostem odległości d i dla dostatecznie dużych d jest równa zero. Wraz ze wzrostem odległości pomiędzy centrami potencjału uwięzienia wzrasta również bariera potencjału pomiędzy kropkami, co prowadzi do zmniejszenia przekrywania się funkcji falowych i w rezultacie do zerowania się energii wymiany. W przypadku potencjału twardego [por. rys. 3.5(b)] otrzymano niemonotoniczny przebieg energii wymiany w funkcji odległości d . Dla



Rysunek 3.5: Energia wymiany J oraz najniższa energia stanu singletowego E_S i trypletowego E_T w funkcji odległości d pomiędzy środkami potencjału uwięzienia dla (a) potencjału miękkiego o $p = 2$ i (b) potencjału twardego o $p = 10$. Pozostałe parametry kropek: $R = 20$ nm, $U_0 = 150$ meV.



Rysunek 3.6: Energia wymiany J w funkcji odległości d pomiędzy środkami kropek kwantowych dla różnej twardości p potencjału uwięzienia. Pozostałe parametry kropek: $R = 20$ nm, $U_0 = 150$ meV.

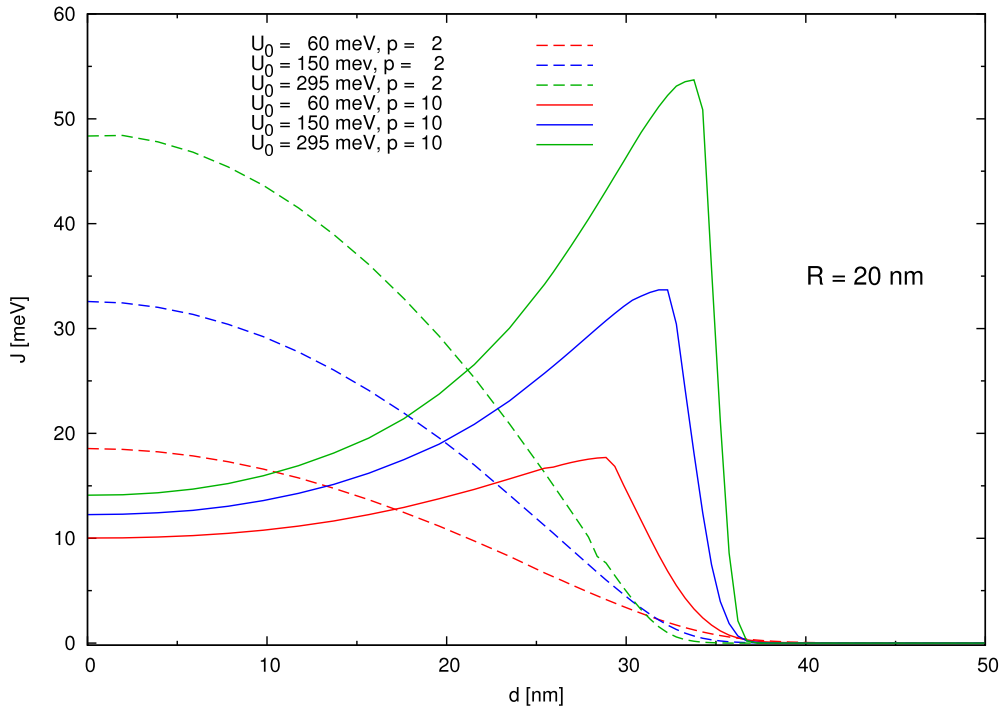
pośrednich odległości d potencjał uwięzienia jako superpozycja potencjałów obu kropek prowadzi do powstania głębokiej i wąskiej studni potencjału na dnie płytkiej i szerokiej studni potencjału [por. rysunek 3.2(b) i 3.2(c)]. Takie właściwości potencjału uwięzienia powodują silną lokalizację elektronów w obszarze głębokiej i wąskiej studni potencjału, co w rezultacie prowadzi do wzrostu energii wymiany J .

Rysunek 3.6 pokazuje zależność energii wymiany J od odległości d pomiędzy środkami kropek kwantowych. Pokazane zostały przebiegi dla różnej twardości potencjału uwięzienia. W przypadku miękkiego potencjału uwięzienia ($p = 2$), energia wymiany maleje wraz ze wzrostem odległości pomiędzy kropkami i dla dostatecznie dużych odległości d spada do zera. Spadek energii wymiany J związany jest ze zmniejszaniem się całki przekrywania wraz ze wzrostem odległości d pomiędzy kropkami. W przypadku twardych potencjałów uwięzienia, czyli dla $p \geq 4$ energia wymiany J wzrasta wraz ze zwiększającą się odległością d pomiędzy kropkami. Dla pewnej odległości

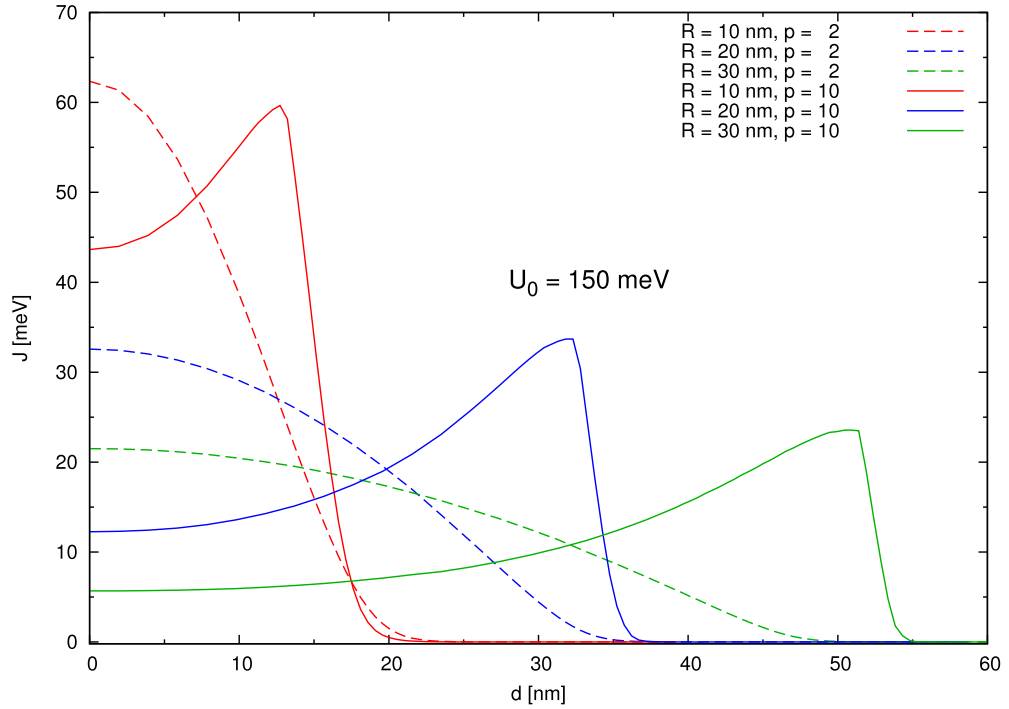
d_{max} osiąga wartość maksymalną, a następnie gwałtownie spada do zera. Taką zależność związana jest z silną lokalizacją elektronów w obszarze wąskiej studni wewnętrznej [por. 3.2(b) i 3.2(c)] i zostanie dokładniej przedyskutowana w podrozdziale 3.2.3. Warto jeszcze zauważyć, że wraz ze zwiększającą się twardością potencjału uwięzienia maksimum energii wymiany J staje się coraz wyraźniejsze oraz maksymalna wartość energii wymiany J_{max} wzrasta wraz ze wzrostem p .

Rysunek 3.7 pokazuje zależność energii wymiany J od odległości d dla różnych głębokości U_0 studni potencjału, przy stałym promieniu kropek równym $R = 20$ nm dla potencjałów o różnej twardości. Widać, że wraz ze wzrostem głębokości studni potencjału wzrasta wartość energii wymiany J .

Rysunek 3.8 pokazuje energię wymiany J w funkcji odległości d dla różnych zasięgów potencjału uwięzienia, przy ustalonej głębokości studni potencjału $U_0 = 150$ meV dla potencjałów o różnej twardości. Widać, że maksy-



Rysunek 3.7: Energia wymiany J w funkcji odległości d pomiędzy środkami kropek kwantowych dla różnej głębokości U_0 potencjału uwięzienia dla potencjału miękkiego o $p = 2$ (linie przerywane) i potencjału twardego o $p = 10$ (linie ciągłe).



Rysunek 3.8: Energia wymiany J w funkcji odległości d pomiędzy środkami kropek kwantowych dla różnego zasięgu R potencjału uwięzienia dla potencjału miękkiego o $p = 2$ (linie przerywane) i potencjału twardego o $p = 10$ (linie ciągłe).

małą wartość energii wymiany uzyskujemy dla najmniejszej z kropek, czyli dla $R = 10$ nm. Wraz ze wzrostem przestrzennych rozmiarów kropek spada wartość całki przekrywania, co prowadzi do obniżenia energii wymiany J . Na rysunkach 3.7 i 3.8 wyraźnie widać różnicę pomiędzy zachowaniem się energii wymiany dla potencjału miękkiego (krzywe przerywane) i potencjału twardego (krzywe ciągłe). Dla potencjałów miękkich mamy monotoniczny spadek energii wymiany w funkcji odległości d pomiędzy środkami kropek. Dla potencjałów twardych zależność ta jest trochę bardziej skomplikowana: najpierw wraz ze wzrostem d zwiększa się wartość energii wymiany J , a po osiągnięciu maksymalnej wartości J_{max} następuje gwałtowny spadek do zera.

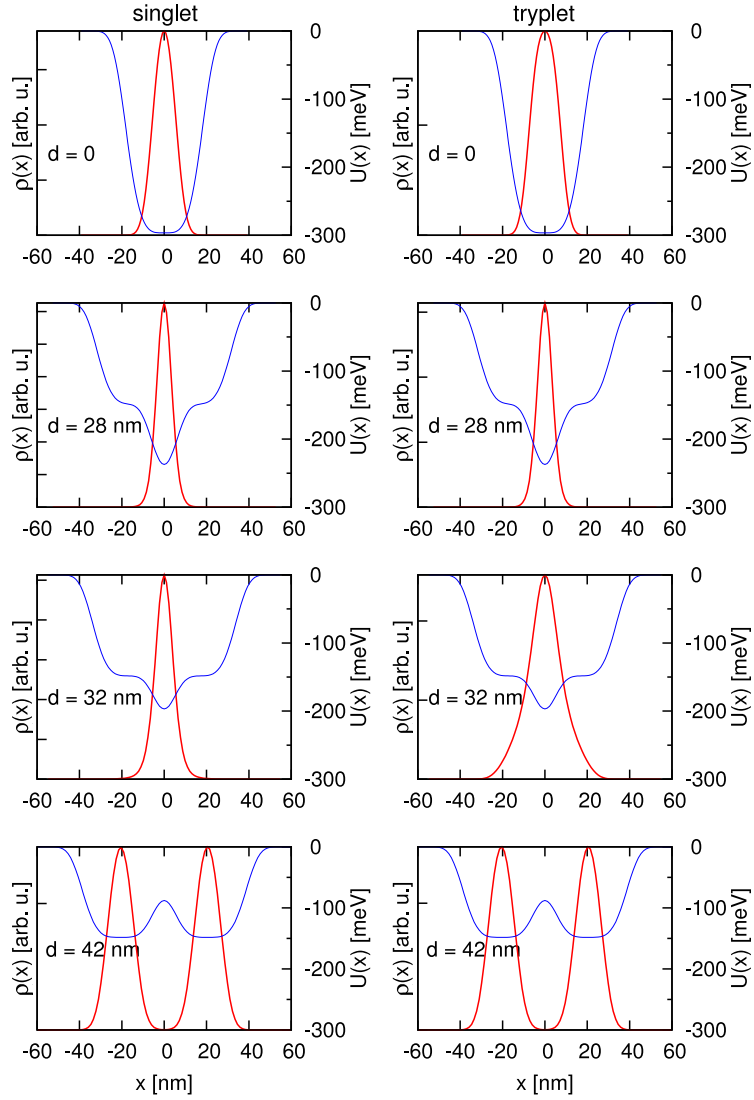
3.2.3 Gęstości jednoelektronowe

W celu wytłumaczenia różnego zachowania się energii wymiany dla potencjałów miękkich ($p = 2$) i twardych ($p \geq 4$), policzone zostały jednoelektronowe gęstości prawdopodobieństwa $\varrho(\mathbf{r})$ (2.9). Właściwości gęstości elektronowych są określone przez potencjał uwięzienia, który posiada różne profile w kierunkach x i y .

Rysunek 3.9 pokazuje potencjał uwięzienia i jednoelektronową gęstość prawdopodobieństwa wzdłuż osi x dla $y = 0$. Dla $d \leq 32$ nm obydwa elektrony są zlokalizowane w pojedynczej studni kwantowej. Dla większych odległości kropka-kropka ($d > 42$ nm) elektrony z równym prawdopodobieństwem zlokalizowane są w różnych kropkach kwantowych rozdzielonych barierą potencjału. Dla pośrednich odległości, czyli $d \approx 30$ nm, w wyniku superpozycji potencjałów poszczególnych kropek tworzy się układ „kropka-w-kropce” (por. rysunek 3.9 dla $d = 28$ i 32 nm). Kropka wewnętrzna, o głębszym potencjale uwięzienia, otoczona jest płytszą studnią potencjału uwięzienia kropki zewnętrznej. Dla tych przypadków elektrony są głównie zlokalizowane w obszarze wewnętrznej kropki kwantowej. Rysunek 3.9 pokazuje, że elektrony w stanie singletowym są silniej zlokalizowane niż w stanie trypletowym. W szczególności dla $d = 32$ nm widzimy, że gęstość elektronowa jest niezerowa także w obszarze zewnętrznej kropki kwantowej.

Rysunek 3.10 pokazuje potencjał uwięzienia i jednoelektronową gęstość prawdopodobieństwa wzdłuż osi y dla $x = 0$. Dla stanu trypletowego otrzymano dwa maksima jednoelektronowej gęstości prawdopodobieństwa rozdzielone przez minimum dla $y = 0$. Rozkład ten wynika bezpośrednio z zakazu Pauliego. W obszarze pośrednich odległości, czyli dla $0 < d < 28$ nm, rozciągłość $\varrho(x, y)$ w kierunkach x i y dla stanu singletowego jest podobna. Jednakże w przypadku stanu trypletowego, rozciągłość gęstości jednoelektronowej w kierunku y jest większa niż w kierunku x .

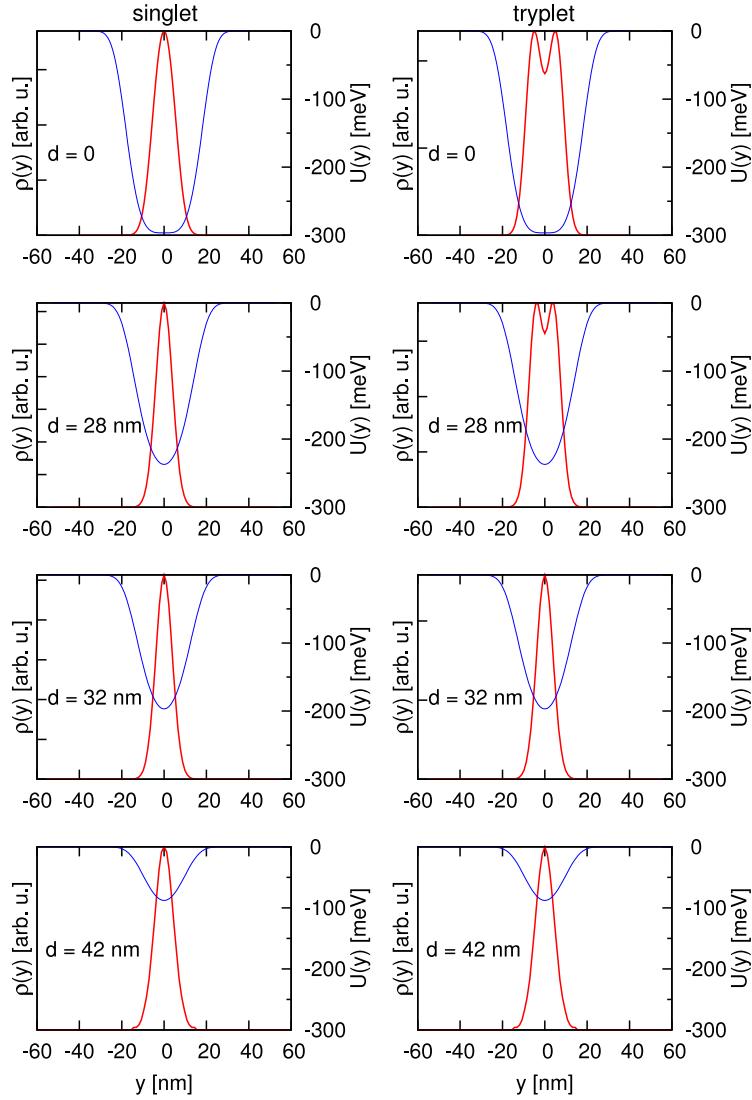
Porównanie rysunków 3.9 i 3.10 daje informacje o lokalizacji elektronów. Dla $d < 32$ nm elektrony o takim samym spinie są silnie zlokalizowane w wewnętrznej kropce kwantowej w kierunku x (por. rys. 3.9) i słabiej zlokalizowane w kierunku y (por. rys. 3.10). Słabsza lokalizacja w kierunku y wynika z większego efektywnego zasięgu potencjału uwięzienia w tym kierunku. Analizując rysunki 3.9 i 3.10 można wytłumaczyć powstawanie maksimum energii wymiany dla twardych potencjałów. Wzrost energii wymiany J spowodowany jest silną lokalizacją elektronów w obszarze wewnętrznej kropki



Rysunek 3.9: Jednoelektronowa gęstość prawdopodobieństwa ρ (linia czerwona) i potencjał uwięzienia U (linia niebieska) w funkcji współrzędnej x dla $y = 0$ dla singletu i trypletu. Parametry kropek: $R = 20$ nm, $U_0 = 150$ meV, $p = 4$.

kwantowej. Silna lokalizacja zwiększa rozszczepienie singlet-tryplet i w rezultacie prowadzi do maksimum energii wymiany dla pośrednich odległości d (por. rys. 3.6).

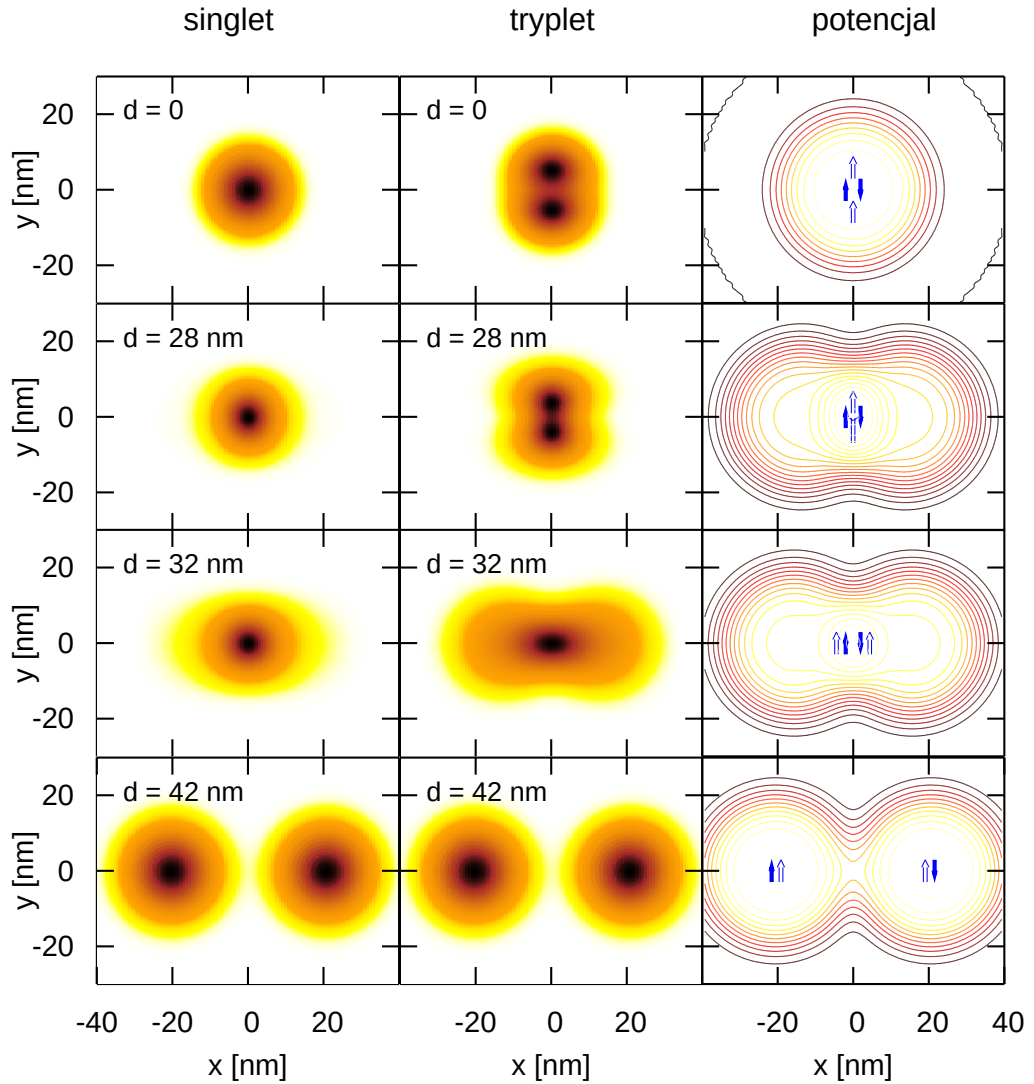
Efekty te są dodatkowo zobrazowane na rysunku 3.11, który przedstawia



Rysunek 3.10: Jednoelektronowa gęstość prawdopodobieństwa ρ (linia czerwona) i potencjał uwięzienia U (linia niebieska) w funkcji współrzędnej y dla $x = 0$ dla singletu i trypletu. Parametry kropek: $R = 20$ nm, $U_0 = 150$ meV, $p = 4$.

mapy jednoelektronowych gęstości prawdopodobieństwa dla singletu i trypletu oraz kontury potencjału uwięzienia w płaszczyźnie $x - y$. Pełne i puste strzałki w sposób schematyczny pokazują miejsca o największej wartości jednoelektronowej gęstości prawdopodobieństwa odpowiednio dla singletu i try-

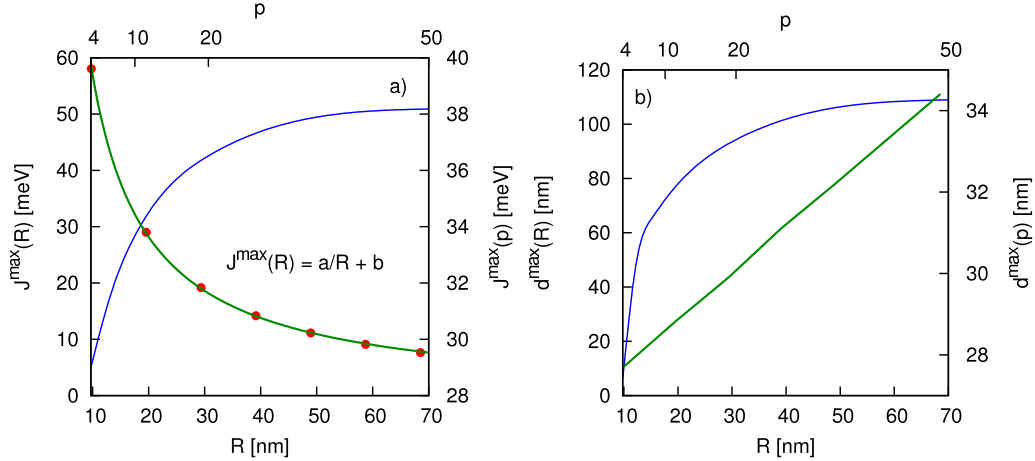
pletu. Dla $d = 0$ potencjał uwięzienia posiada symetrię obrotową. Oznacza to, że odpowiednie rysunki elektronowej gęstości prawdopodobieństwa można obrócić o dowolny kąt nie zmieniając energii układu. Rysunek 3.11 dla $d = 28$ nm odpowiada przypadkowi maksymalnej energii wymiany J_{max} dla



Rysunek 3.11: Mapy gęstości jednoelektronowych dla singletu i trypletu oraz kontury potencjału uwięzienia dla wybranych odległości d . Niebieskie pełne (puste) strzałki pokazują miejsca o największej wartości gęstości jednoelektronowej dla singletu (trypletu). Parametry kropek: $R = 20$ nm, $U_0 = 150$ meV, $p = 4$.

potencjału twardego o $p = 4$. Widać, że elektronowa gęstość prawdopodobieństwa jest anizotropowa na płaszczyźnie $x - y$. W stanie trypletowym elektrony są zlokalizowane w wewnętrznej kropce kwantowej wzdłuż osi y . Ta lokalizacja gwałtownie zmienia się dla $d > 28$ nm i elektronowa gęstość prawdopodobieństwa staje się silnie rozmyta w kierunku osi x (por. rys. 3.11). Rysunki 3.9 – 3.11 pokazują, że dla dużych odległości d , jednoelektronowa gęstość prawdopodobieństwa jest taka sama dla singletu i trypletu, co prowadzi do degeneracji singlet-tryplet. Degeneracja ta oznacza zerowanie się energii wymiany J .

Rysunek 3.12(a) pokazuje zależność maksymalnej wartości energii wymiany J_{max} od zasięgu potencjału uwięzienia R oraz od twardości potencjału p . Maksymalna energia wymiany J_{max} rośnie wraz ze wzrostem p do maksymalnej wartości asymptotycznej dla $p \rightarrow \infty$. Natomiast J_{max} szybko maleje wraz ze wzrostem zasięgu potencjału uwięzienia R . Zależność J_{max} od zasięgu potencjału pozwala nam na określenie wpływu rozmiaru kropki na energię wymiany. Zależność ta może być sparametryzowana następującym wzorem:



Rysunek 3.12: (a) Maksimum energii wymiany J_{max}^max w funkcji zasięgu R potencjału uwięzienia (linia zielona) dla $p = 4$ oraz w funkcji twardości p (linia niebieska) dla $R = 20$ nm. Czerwone kropki pokazują wyniki obliczeń, krzywa ciągła pokazuje dopasowaną krzywą (3.1). (b) Odległość d_{max}^max pomiędzy środkami kropek, dla której energia wymiany osiąga wartość maksymalną J_{max}^max w funkcji zasięgu R potencjału uwięzienia (linia zielona) dla $p = 4$ oraz w funkcji twardości p (linia niebieska) dla $R = 20$ nm. Obliczenia zostały wykonane dla głębokości potencjału $U_0 = 150$ meV.

$$J_{max}(R) = a/R + b, \quad (3.1)$$

gdzie $a = 575.3 \text{ meV} \times \text{nm}$ i $b = -0.6 \text{ meV}$.

Przy ustalonych parametrach p i U_0 maksimum energii wymiany J_{max} zależy nie tylko od R , ale także od odległości pomiędzy centrami potencjału uwięzienia. Rysunek 3.12(b) pokazuje zależność odległości d^{max} pomiędzy środkami kropek, dla której energia wymiany J ma wartość maksymalną $J^{max} = J(d^{max})$, od zasięgu potencjału uwięzienia R oraz od twardości potencjału p . Widać, że zależność d^{max} może być dobrze przybliżona za pomocą funkcji liniowej. Na podstawie rysunku 3.12 można określić parametry kropek kwantowych, dla których energia wymiany J będzie miała wartość maksymalną.

3.3 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale przedstawione zostały wyniki obliczeń [30] wpływu kształtu potencjału uwięzienia na oddziaływanie wymienne pomiędzy elektronami w sprzężonych bocznie kropkach kwantowych. Parametryzacja potencjału uwięzienia za pomocą wzoru potęgowo-eksponencjalnego (2.1) pozwala na modelowanie elektrostatycznych kropek kwantowych [37].

Pokazano, że zmiana kształtu potencjału uwięzienia w sposób istotny wpływa na oddziaływanie wymienne pomiędzy elektronami. W szczególności dla potencjałów twardych prowadzi do niemonotonicznej zależności energii wymiany J od odległości d pomiędzy centrami potencjału uwięzienia.

Zależność energii wymiany J od odległości d pomiędzy środkami kropek jest różna dla potencjałów miękkich ($p = 2$) i twardych ($p \geq 4$). Dla potencjałów miękkich, energia wymiany J jest monotonicznie malejącą funkcją d . Spadek energii wymiany J związany jest ze zmniejszaniem się całki przekrywania wraz ze wzrostem odległości d pomiędzy centrami potencjału uwięzienia. W przypadku potencjałów twardych energia wymiany J wzrasta wraz ze zwiększającą się odległością d pomiędzy kropkami. Dla pewnej odległości $d = d^{max}$ osiąga wartość maksymalną, a następnie gwałtownie spada do zera. Taka zależność związana jest z silną lokalizacją elektronów w obszarze wąskiej wewnętrznej studni potencjału. Taki kształt potencjału uwięzienia można znaleźć w realizowalnych eksperymentalnie heterostrukturach

półprzewodnikowych [53] lub układach koloidalnych znanych w literaturze pod nazwą „core-shell quantum dot” [54]. Dla dużych odległości d mamy degenerację singlet-tryplet, co prowadzi do zerowania się energii wymiany J .

Wraz ze wzrostem głębokości studni potencjału U_0 wzrasta także energia wymiany J . Jest to spowodowane silniejszą lokalizacją elektronów w obrębie kropek kwantowych. Zwiększanie zasięgu R potencjału uwięzienia powoduje wzrost efektywnych rozmiarów przestrzennych kropek kwantowych, co prowadzi do zmniejszenia całek przekrywania i w rezultacie do obniżenia energii wymiany J .

Pokazane w tym rozdziale wyniki pozwalają na określenie wpływu parametrów nanourządzeń półprzewodnikowych, w szczególności ich rozmiarów i geometrii na oddziaływanie wymienne, a zatem wyniki te mogą być pomocne w projektowaniu nanourządzeń, dla których energia wymiany jest maksymalna.

Rozdział 4

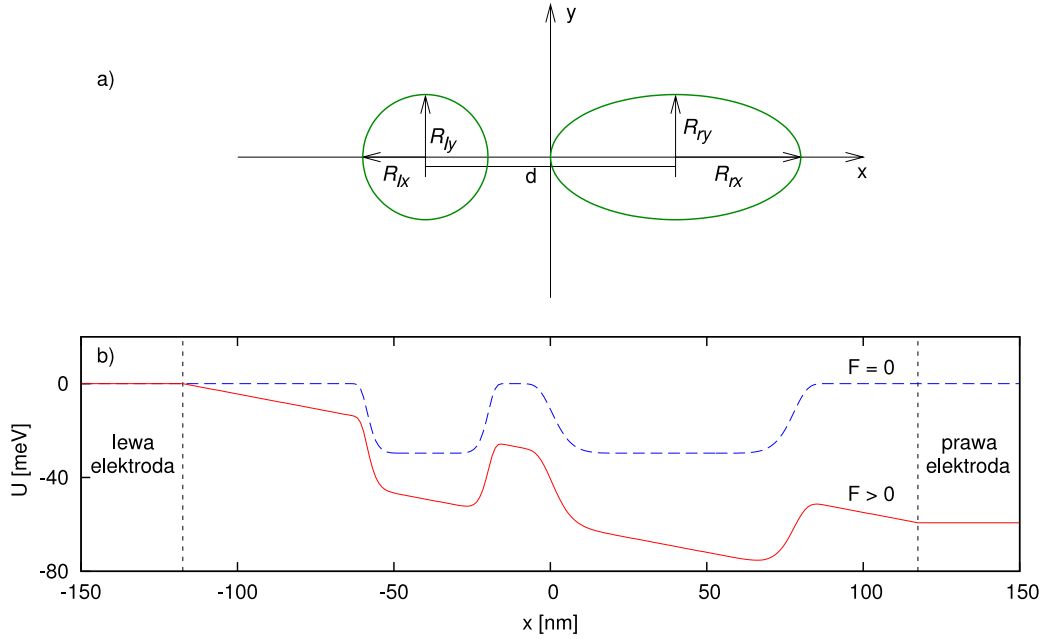
Sterowanie oddziaływaniem wymiennym za pomocą pola elektrycznego

W rozdziale tym przedstawiono wyniki badań wpływu zewnętrznego pola elektrycznego na oddziaływanie wymienne pomiędzy elektronami uwięzionymi w sprzężonych bocznie kropkach kwantowych. Wyniki te zostały opublikowane w artykułach [49, 55]. Metodą mieszania konfiguracji (CI) wyznaczona została energia wymiany dla nanoukładów złożonych ze sprzężonych bocznie kropek kwantowych o różnych kształtach i rozmiarach umieszczonych pomiędzy dwoma elektrodami, pomiędzy którymi przyłożono napięcie V . Parametryzacja potencjału uwięzienia w postaci funkcji potęgowo-eksponencjalnej (2.2) pozwala na modelowanie realistycznego potencjału uwięzienia w kropkach kwantowych [36, 38].

Wykonano obliczenia energii wymiany J w funkcji pola elektrycznego F dla układów złożonych z kołowych i/lub eliptycznych kropek kwantowych, które różnią się między sobą rozmiarem i/lub orientacją względem pola elektrycznego.

4.1 Schemat układu

Układ dwóch sprzężonych bocznie kropek kwantowych tworzy 16 różnych geometrycznych konfiguracji, które różnią się kształtem kropek (kołowa/eliptyczna), rozmiarem (duża/mała), położeniem względem elektrod (lewa/prawa).



Rysunek 4.1: a) Schemat geometrii układu sprzężonych kropek kwantowych; b) potencjał uwięzienia w funkcji x dla $y = 0$ dla pola elektrycznego $F = 0$ i $F > 0$.

W rozdziale tym przedstawione zostaną wyniki obliczeń dla czterech najbardziej charakterystycznych konfiguracji.

Zbadany został układ dwóch elektronów związanych w dwóch sprzężonych bocznie kropkach kwantowych, znajdujących się w obszarze jednorodnego pola elektrycznego. Sprzężone bocznie kropki kwantowe wytwarzane są zazwyczaj poprzez przyłożenie odpowiednio dobranych napięć do elektrod znajdujących się na powierzchni heterostruktury zawierającej quasi-dwuwymiarowy gaz elektronowy [3, 4, 6]. Z tego powodu do parametryzacji potencjału uwięzienia użyto dwuwymiarowej funkcji potęgowo-eksponencjalnej (2.2). Wykorzystanie wzoru (2.2) pozwala na zbadanie szerokiej klasy potencjałów uwięzienia o różnych rozmiarach i geometrii. Na rysunku 4.1 przedstawiono schemat geometrii układu (a) oraz profil energii potencjalnej wzdłuż osi x dla $y = 0$ (b).

Układ sprzężonych kropek kwantowych znajduje się pomiędzy dwoma elektrodami zewnętrznymi. Elektrody te są naniesione w odległości L od siebie i przyłożone jest do nich napięcie V . W obszarze półprzewodnika pomiędzy elektrodami powstaje jednorodne pole elektryczne $\mathbf{F} = (-F, 0, 0)$, gdzie

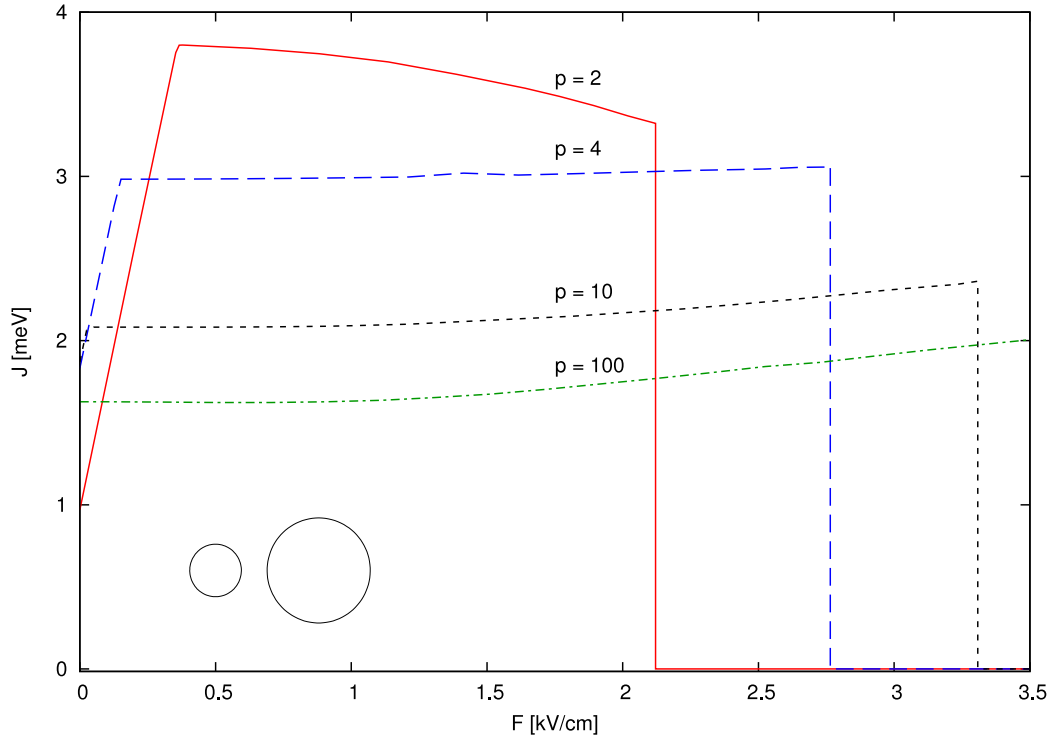
$F = V/L$. W obliczeniach przyjęto odległość pomiędzy elektrodami większą niż rozmiar układu sprzężonych kropek kwantowych, czyli: $L > d + R_{lx} + R_{rx}$.

Problem jednoelektronowy (2.6) rozwiązano metodą wariacyjną z użyciem wielocentrowych gaussianów. Otrzymane funkcje i energie jednoelektronowe wykorzystane zostały do rozwiązania problemu dwuelektronowego (2.5). Dokładny opis metody numerycznej i schemat rozwiązania przedstawiono w Dodatku A.

4.2 Wyniki

Rysunki 4.2-4.4 prezentują wyniki dla układu, w którym prawa kropka (położona bliżej elektrody o niższej energii potencjalnej) jest większa. Wyniki te otrzymano dla układów, w których lewa kołowa kropka kwantowa miała rozmiary: $R_{lx} = R_{ly} = 20$ nm, natomiast prawe kropki różniły się rozmiarami i kształtem: kołowa (por. rys. 4.2, $R_{lx} = R_{ly} = 40$ nm), eliptyczna z dłuższą półosią równoległą do osi y (por. rys. 4.3, $R_{lx} = 20$ nm, $R_{ly} = 40$ nm) i eliptyczna z dłuższą półosią równoległą do osi x (por. rys. 4.4, $R_{lx} = 40$ nm, $R_{ly} = 20$ nm). Ogólna zależność energii wymiany J od pola elektrycznego dla powyższych układów jest bardzo podobna. W zakresie słabych pól, energia wymiany przyjmuje małą (por. rys. 4.2) lub zerową wartość (por. rys. 4.3-4.4). Wraz ze wzrostem pola elektrycznego wzrasta także wartość energii wymiany. Po przekroczeniu pewnego pola granicznego, kończy się wzrost energii wymiany wraz z polem elektrycznym i zaczyna się obszar, w którym energia wymiany prawie nie zależy od pola (por. rys. 4.3) lub zmienia się wraz ze wzrostem pola F w zależności od twardości potencjału uwięzienia p (por. rys. 4.2 i 4.4). W tym obszarze $J(F)$ przyjmuje wartość maksymalną. Przy dostatecznie silnych polach elektrycznych w zależności $J(F)$ pojawia się skok i energia wymiany gwałtownie spada do zera.

Rysunki 4.2-4.4 przedstawiają jeszcze jedną ogólną zależność: maksymalna wartość energii wymiany maleje wraz ze wzrostem twardości potencjału uwięzienia. Jednakże szczegółowa zależność energii wymiany od pola elektrycznego jest różna dla różnych rozważanych nanoukładów. Zależność energii wymiany od pola elektrycznego jest różna dla układów złożonych z kołowych (por. rys. 4.2) i eliptycznych (por. rys. 4.3-4.4) kropek kwantowych. Dla kropek kołowych energia wymiany jest różna od zera w przypadku braku pola elektrycznego. W układzie, którego schematyczna geometria przedstawiona jest na wstawce do rysunku 4.2, elektrony w stanie singletowym zlokalizo-

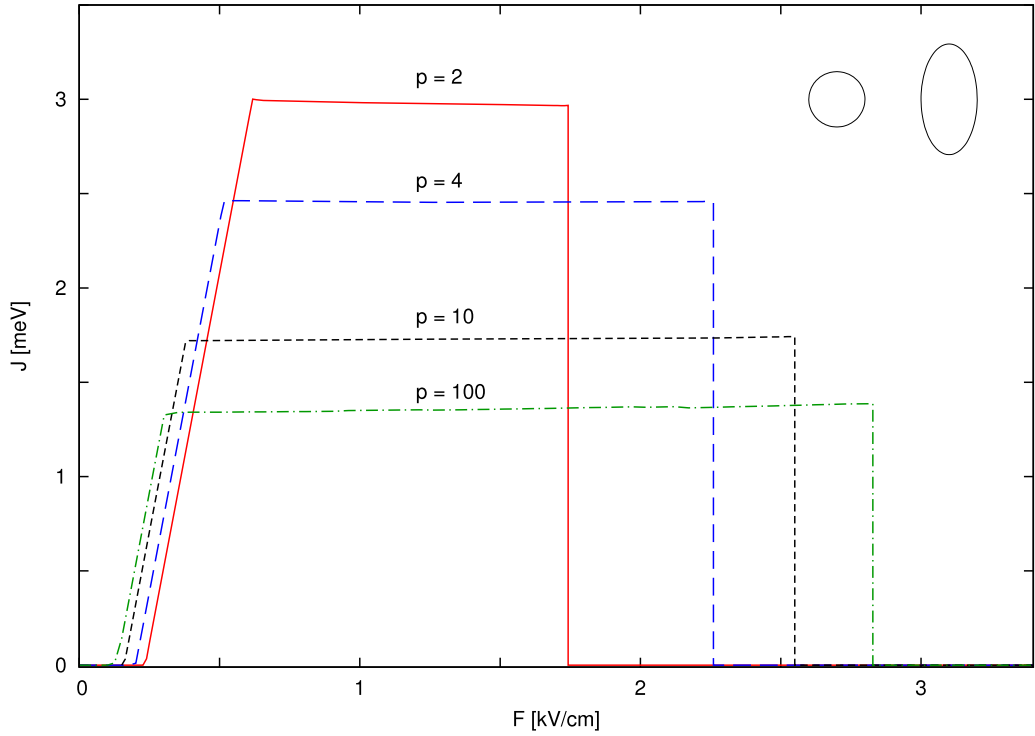


Rysunek 4.2: Energia wymiany J dla dwóch kołowych kropek kwantowych w funkcji pola elektrycznego F dla potencjałów o różnej twardości. Parametry kropek: $R_{lx} = R_{ly} = 20$ nm, $R_{rx} = R_{ry} = 40$ nm, $d = 80$ nm. Wstawka: schemat geometrii układu.

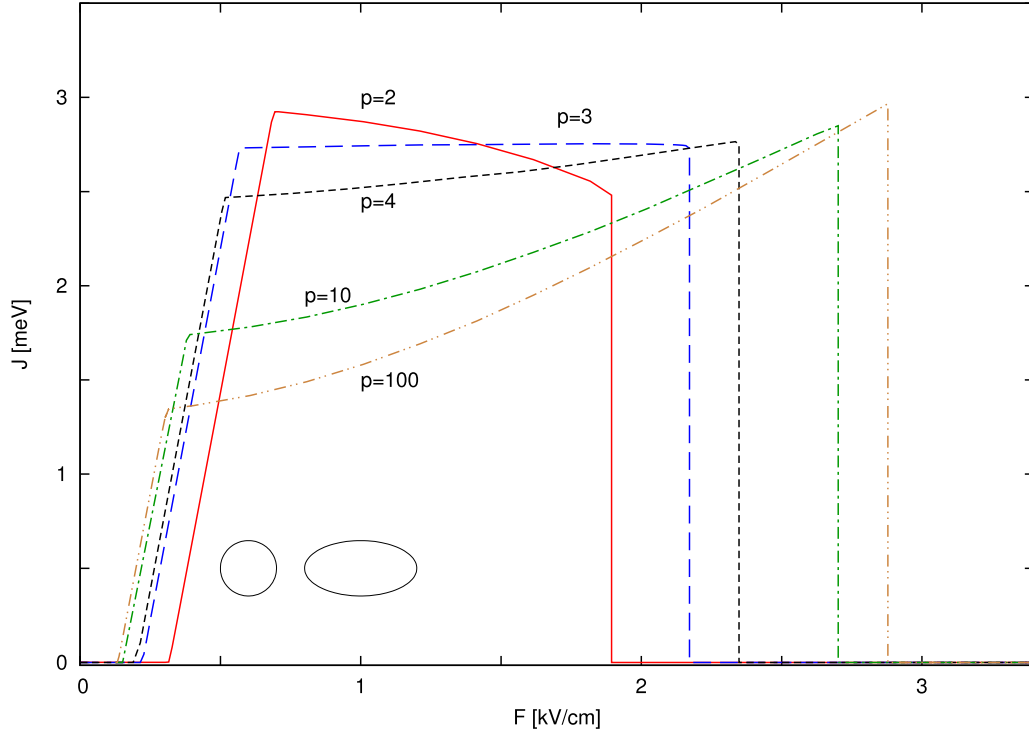
wane są w prawej kropce. Podwójne obsadzenie prawej kropki realizowane jest z dużym prawdopodobieństwem nawet w zerowym polu F . Wzrastające pole elektryczne powoduje całkowitą lokalizację elektronów w prawej kropce i cały układ sprzężonych kropek kwantowych zaczyna działać jak pojedyncza kropka kwantowa [55].

Jeżeli prawa kropka jest eliptyczna (por. rys. 4.3-4.4), wtedy dla słabych pól elektrycznych, czyli $0 \leq F \leq F_{c0}$, obydwie kropki kwantowe są pojedynczo obsadzone, nie ma przekrywania się funkcji falowych i energia wymiany jest równa zero. Dla pól elektrycznych z przedziału $F_{c0} \leq F \leq F_{c1}$ występuje liniowy wzrost J . Dla $F = F_{c1}$ zależność $J(F)$ wykazuje pierwsze załamanie, powyżej którego $J(F)$ jest prawie stałe (por. rys. 4.3) lub powoli zmienia się z polem F (por. rys. 4.4). W przedziale pól elektrycznych $F_{c1} \leq F \leq F_{c2}$ energia wymiany przyjmuje wartość maksymalną J_{max} . Dla $F = F_{c2}$ następuje drugie załamanie i energia wymiany spada do zera dla $F \geq F_{c2}$. Dla

nanoukładu z rysunku 4.4 przebieg $J(F)$ w przedziale $F_{c1} \leq F \leq F_{c2}$ zależy od twardości potencjału uwięzienia. Dla potencjału gaussowskiego ($p = 2$) J maleje ze wzrostem F , jest prawie stała dla $p = 3$ i rośnie wraz ze wzrostem F dla $p \geq 4$. Dla nanoukładów, których geometrie przedstawione są na wstawkach do rysunków 4.3 i 4.4, elektrony zlokalizowane są w różnych kropkach dla $F \leq F_{c0}$, całka przekrywania funkcji falowych jest równa zero, co prowadzi do zerowania energii wymiany. Jeżeli pole elektryczne przekracza wartość F_{c0} , elektrony w stanie singletowym są całkowicie zlokalizowane w prawej kropce, natomiast w stanie trypletowym następuje stopniowe przelewanie ładunku elektrycznego z lewej kropki do prawej. Prowadzi to do wzrostu energii wymiany w przedziale $F_{c0} \leq F \leq F_{c1}$. W przedziale pośrednich pól elektrycznych $F_{c1} \leq F \leq F_{c2}$ elektrony zarówno w stanie singletowym jak i trypletowym zlokalizowane są w prawej kropce kwantowej, ta lokalizacja utrzymuje się aż do $F = F_{c2}$. Prowadzi to do sytuacji, w której J jest pra-



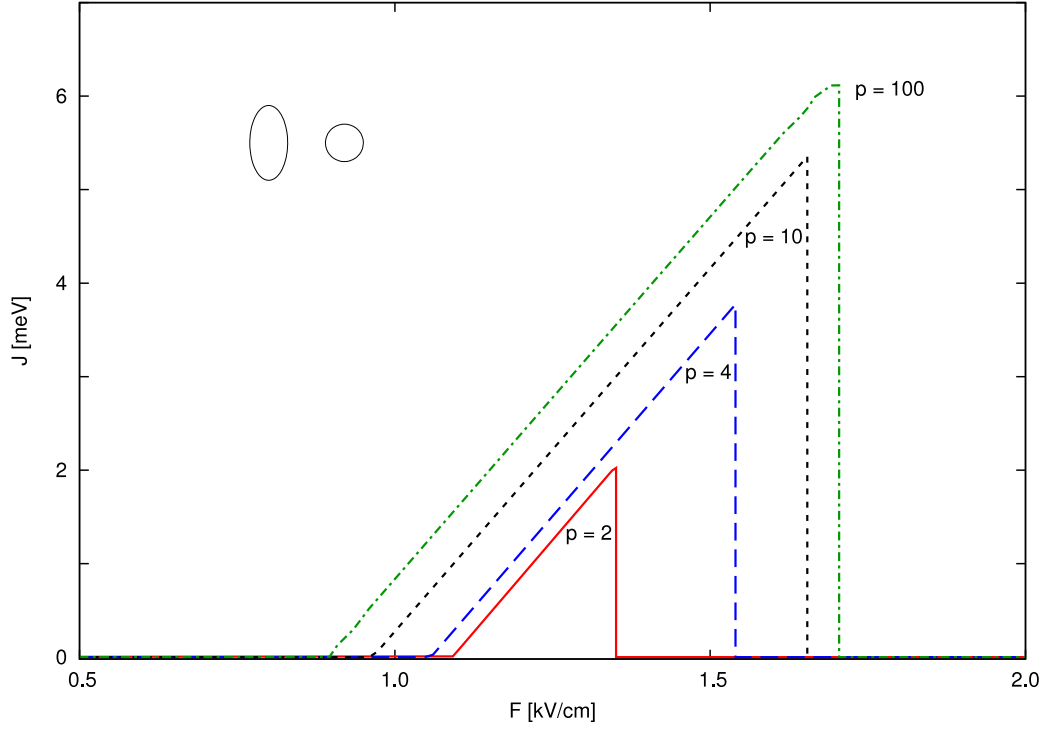
Rysunek 4.3: Energia wymiany J dla układu kołowej i eliptycznej kropki kwantowej w funkcji pola elektrycznego F dla potencjałów o różnej twardości. Parametry kropek: $R_{lx} = R_{ly} = 20$ nm, $R_{rx} = 20$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $d = 80$ nm. Wstawka: schemat geometrii układu.



Rysunek 4.4: Energia wymiany J dla układu kołowej i eliptycznej kropki kwantowej w funkcji pola elektrycznego F dla potencjałów o różnej twardości. Parametry kropek: $R_{lx} = R_{ly} = 20$ nm, $R_{rx} = 40$ nm, $R_{ry} = 20$ nm, $d = 80$ nm. Wstawka: schemat geometrii układu.

wie stałe (por. rys 4.3) lub w zależności od twardości potencjału uwięzienia zmienia się z polem elektrycznym (por. rys. 4.4). Dla dostatecznie silnych pól elektrycznych ($F > F_{c2}$) energia wymiany J gwałtownie spada do zera. Jest to spowodowane tym, że jeden z elektronów w stanie trypletowym wytunelowuje z układu sprzężonych kropek kwantowych i zostaje zaabsorbowany w prawej elektrodzie, a zatem przekrywanie funkcji falowych elektronów spada do zera.

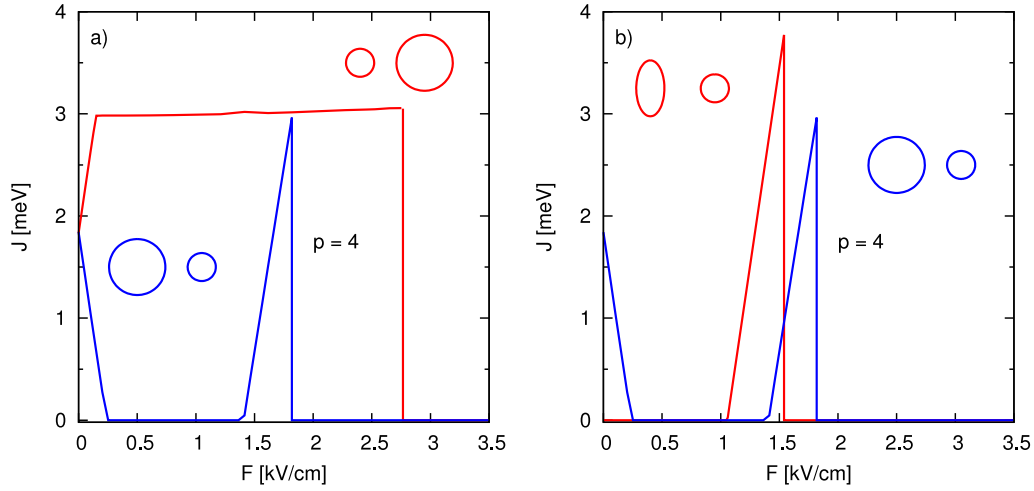
Rysunek 4.5 prezentuje wyniki dla układu, w którym lewa kropka kwantowa jest większa od prawej (geometria układu pokazana jest na wstawce do rysunku). Dla $F \leq F_{c0}$ energia wymiany jest równa zero. Jeżeli wartość pola elektrycznego przekracza F_{c0} , wtedy J wzrasta liniowo wraz ze wzrostem pola elektrycznego. Po osiągnięciu wartości maksymalnej dla $F = F_{c1}$, energia wymiany gwałtownie spada do zera. Dla tego układu nie ma zakresu pola elektrycznego, w którym energia wymiany jest stała. Oznacza to, że



Rysunek 4.5: Energia wymiany J dla układu eliptycznej i kołowej kropki kwantowej w funkcji pola elektrycznego F dla potencjałów o różnej twardości. Parametry kropek: $R_{lx} = 20$ nm, $R_{ly} = 40$ nm, $R_{rx} = R_{ry} = 20$ nm, $d = 80$ nm. Wstawka: schemat geometrii układu.

$$F_{c1} = F_{c2}.$$

Rysunek 4.6(a) przedstawia zależność energii wymiany J od pola elektrycznego dla układów różniących się położeniem kropek względem elektrod. Parametry małych kropek kwantowych $R_x = R_y = 20$ nm i dużych $R_x = R_y = 40$ nm są takie same dla obu układów. W przypadku braku pola elektrycznego energia wymiany J przyjmuje taką samą wartość dla obu układów. Niezerowa wartość J w zerowym polu elektrycznym jest rezultatem podwójnego obsadzenia większej kropki kwantowej przez elektrony w stanie singletowym. Elektrony w stanie trypletowym zlokalizowane są w różnych kropkach kwantowych. Dla układu z dużą prawą kropką, wzrastające pole elektryczne powoduje szybkie przejście elektronów w stanie trypletowym do prawej kropki. Energia wymiany wzrasta aż do momentu, w którym osiąga wartość taką jak w pojedynczej kropce kwantowej [55]. Po przekroczeniu pola elektrycznego F_{c2} jeden z elektronów w stanie trypletowym wytunelowuje



Rysunek 4.6: Energia wymiany J w funkcji pola elektrycznego F dla (a) układów różniących się położeniem kropek względem zwrotu pola elektrycznego dla parametrów małych kropek: $R_x = R_y = 20$ nm, dużych kropek: $R_x = R_y = 40$ nm; (b) układów różniących się kształtem lewych kropek kwantowych. Parametry małych kropek kołowych: $R_x = R_y = 20$ nm, dużej kropki kołowej: $R_x = R_y = 40$ nm, eliptycznej kropki kwantowej: $R_x = 20$ nm, $R_y = 40$ nm. Krzywe czerwone (niebieskie) odpowiadają schematom czerwonym (niebieskim) pokazanym na wstawkach.

z układu i jest absorbowany w prawej elektrodzie, energia wymiany spada zatem do zera. Dla układu z lewą kropką większą, pole elektryczne prowadzi do pojedynczego obsadzenia kropek kwantowych zarówno w stanie singletowym jak i trypletowym, co prowadzi do wyzerowania energii wymiany. Po przekroczeniu pola elektrycznego F_{c0} elektrony w stanie singletowym lokalizują się w prawej mniejszej kropce i następuje liniowy wzrost energii wymiany J , aż do momentu, w którym jeden z elektronów w stanie trypletowym wytunelowuje z układu, a energia wymiany J gwałtownie spada do zera (por. rys. 4.5). Zmiana lewej kropki z kołowej na eliptyczną [por. rys. 4.6(b)] zmienia zależność energii wymiany J od pola elektrycznego. W szczególności, ze względu na mniejszą pojemność kwantową kropki eliptycznej, dla zerowego pola elektrycznego nie ma podwójnego obsadzenia kropek i energia wymiany jest równa zero.

Wyniki pokazane na rysunkach 4.2-4.6 pokazują, że w obszarze niskich i pośrednich pól elektrycznych zależność energii wymiany J od pola elek-

trycznego F może być sparametryzowana przy użyciu funkcji liniowej

$$J(F) = \alpha F + \beta . \quad (4.1)$$

Dla układów z rysunków 4.2-4.5 parametryzacja liniowa (4.1) jest dobrym przybliżeniem w przedziale pól elektrycznych $\Delta F_{linear} = F_{c1} - F_{c0}$. Parametr β zależy od twardości potencjału uwięzienia i geometrii rozpatrywanego układu. W ogólności β wzrasta wraz ze wzrostem twardości potencjału uwięzienia i dla nanoukładu z rys. 4.5 przyjmuje wartości od -8.56 meV dla $p = 2$ do -6.86 meV dla $p = 100$. Wyniki przedstawione na rysunkach 4.3-4.5 pokazują, że wartość parametru α nie zależy od twardości potencjału uwięzienia ani od geometrii nanoukładu. Dla wszystkich rozważanych układów parametr ten przyjmował prawie stałą wartość $\alpha \approx 7.73$ [meV/(kV/cm)]. Właściwość ta zostanie przedyskutowana w podrozdziale 4.3.

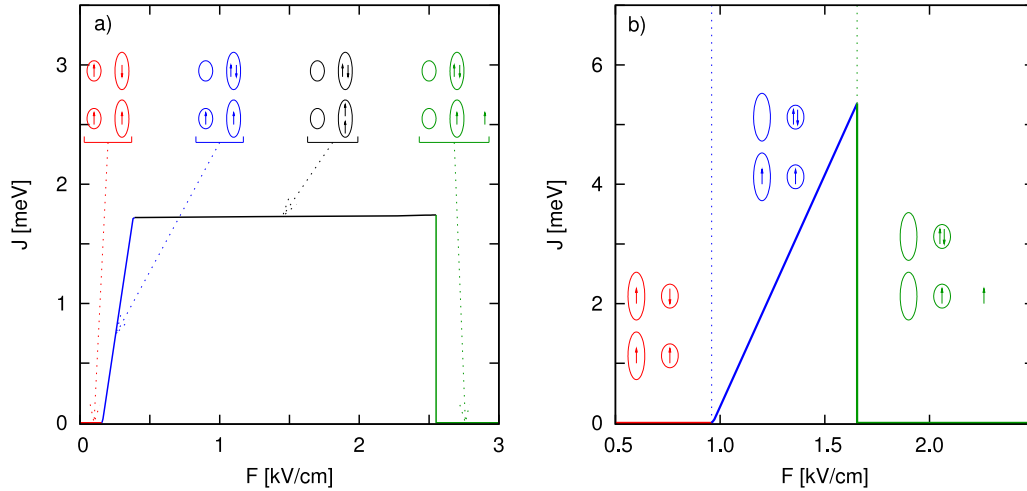
4.3 Dyskusja

W celu wyjaśnienia właściwości energii wymiany zaprezentowanych w podrozdziale 4.2 przeanalizowane zostały zmiany lokalizacji elektronów w kropkach kwantowych pod wpływem pola elektrycznego.

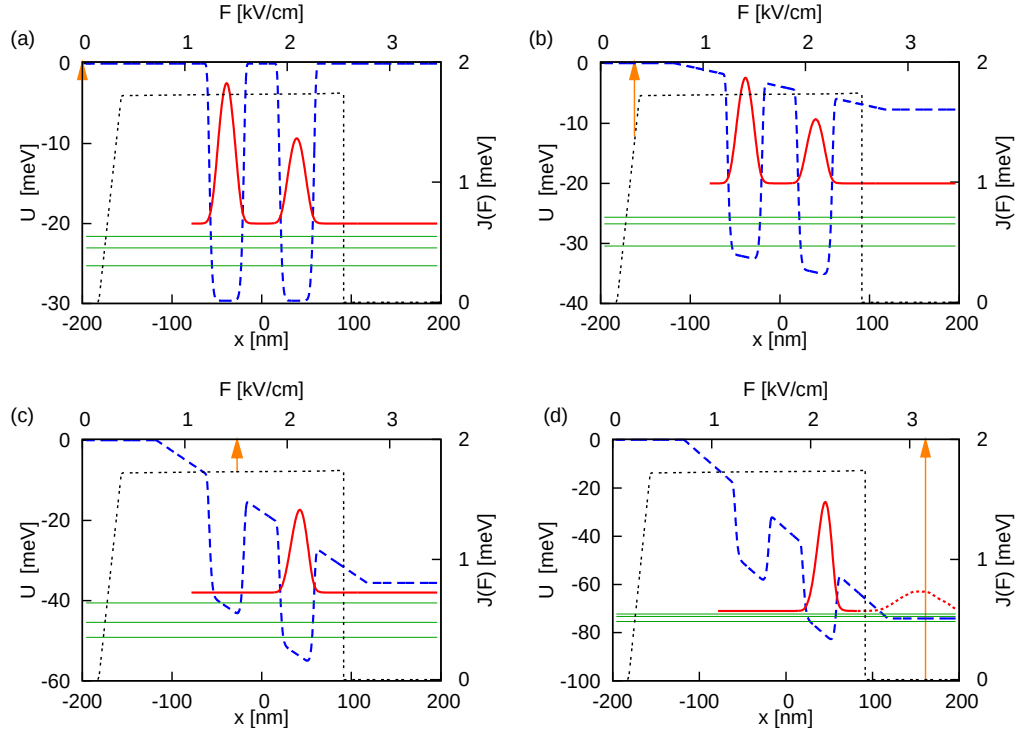
Rysunek 4.7 przedstawia schematycznie konfiguracje elektronowe w różnych przedziałach pola elektrycznego dla dwóch układów: (a) z prawą kropką większą niż lewa (por. rys. 4.3) i (b) prawą kropką mniejszą niż lewa (por. rys. 4.5). Dla słabych pól elektrycznych ($F < F_{c0}$) elektrony zarówno w stanie singletowym jak i trypletowym zlokalizowane są w różnych kropkach kwantowych i energia wymiany jest równa zeru (schematy czerwone). W przedziale $F_{c0} < F < F_{c1}$ elektrony w stanie singletowym zlokalizowane są w prawej kropce, natomiast w stanie trypletowym następuje stopniowe przelewanie się ładunku elektrycznego z lewej kropki do prawej (schematy niebieskie). W tym obszarze pól następuje liniowy wzrost energii wymiany J w funkcji F aż do momentu podwójnego obsadzenia prawej kropki kwantowej dla $F = F_{c1}$. Dla układu z prawą kropką większą, w przedziale pól $F_{c1} < F < F_{c2}$ otrzymujemy podwójne obsadzenie prawych kropek niezależnie od stanów spinowych elektronów (schematy czarne). W tym przedziale energia wymiany J prawie nie zależy od pola elektrycznego F , gdyż jego wpływ jest kompensowany przez rozsuniecie elektronów w kierunku prostopadłym do pola. Po przekroczeniu

pola F_{c2} jeden z elektronów w stanie trypletowym wytunelowuje z układu i zostaje zaabsorbowany przez prawą elektrodę (schematy zielone), a zatem energia wymiany gwałtownie spada do zera. Należy zauważyć, że dla układu z prawą kropką kwantową mniejszą od lewej nie istnieje konfiguracja, w której obydwa elektrony w stanie trypletowym zlokalizowane są w prawej kropce kwantowej [por. rys. 4.7(b)].

Na rysunkach 4.8–4.11 przedstawiono przestrzenną lokalizację elektronów w sposób bardziej ilościowy. Ciągłe czerwone linie na rysunkach 4.8 i 4.9 pokazują profil gęstości elektronowej $\rho(x, y = 0)$ dla stanu trypletowego wzdłuż osi x . Przerywane niebieskie linie pokazują profil potencjału uwięzienia $U(x, 0)$, a czarne kropkowane - energię wymiany J . Zielone poziome linie prezentują trzy najniższe poziomy jednoelektronowe E_ν . Odpowiednie stany jednoelektronowe wnoszą największy wkład do konfiguracji dwuelektronowych. Pomarańczowe strzałki pokazują wartość pola elektrycznego, dla którego zrobione są wykresy ρ , U i E_ν . Rysunki 4.10 i 4.11 prezentują mapy gęstości elektronowej $\rho(x, y)$ na płaszczyźnie $x - y$ dla singletu i trypletu. Rysunki 4.8 i 4.10 pokazują wyniki dla układu złożonego z lewej kropki kołowej i prawej kropki eliptycznej o dłuższej półosi równoległej do osi y (schematyczny rysunek geometrii układu pokazuje wstawka do rys. 4.3). Można zauważyć, że



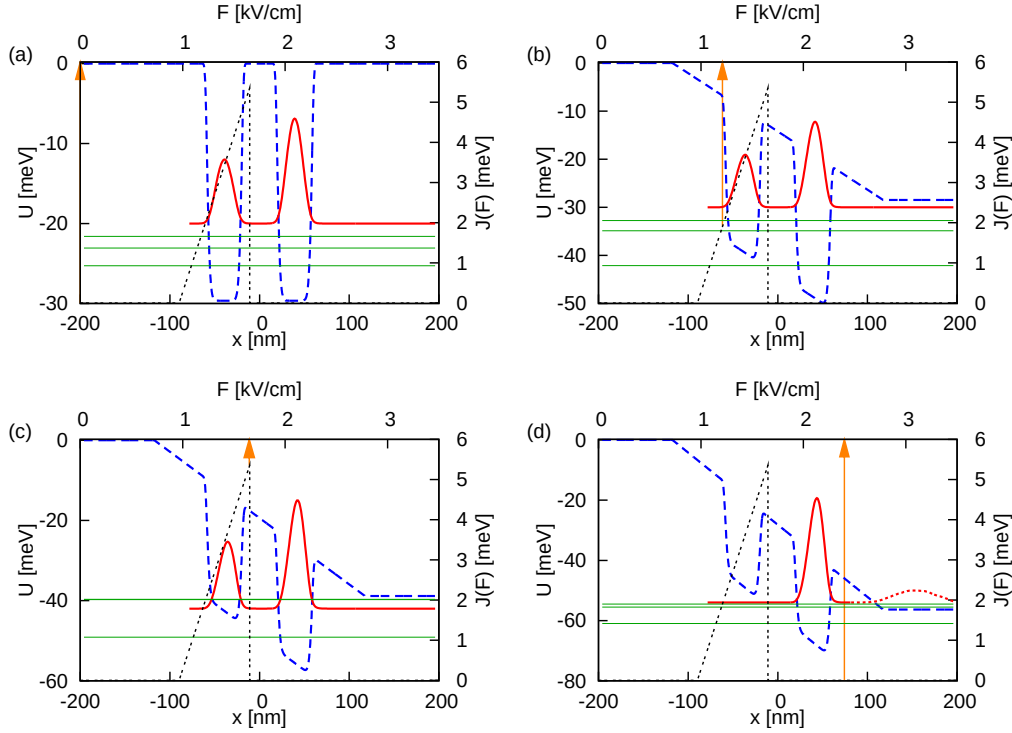
Rysunek 4.7: Schematy konfiguracji elektronowych w różnych przedziałach pól elektrycznych dla układów z prawą kropką większą (a) i prawą kropką mniejszą niż lewa (b). Schematy górne odpowiadają stanowi singletowemu, dolne - trypletowemu.



Rysunek 4.8: Gęstość elektronowa w stanie trypletowym (ciągła linia czerwona) i profil potencjału uwięzienia wzdłuż osi x (niebieska przerywana linia). Zielone linie poziome pokazują poziomy jednoelektronowe, a czarna kropkowana krzywa pokazuje energię wymiany J . Parametry układu: $R_{lx} = R_{ly} = R_{rx} = 20$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $d = 80$ nm, $p = 10$.

mniejsze wartości $\rho(x, 0)$ w większej (prawej) kropce (por. rys. 4.8(a, b)) są skompensowane przez większą rozciągłość gęstości elektronowej wzdłuż osi y (por. rys. 4.10).

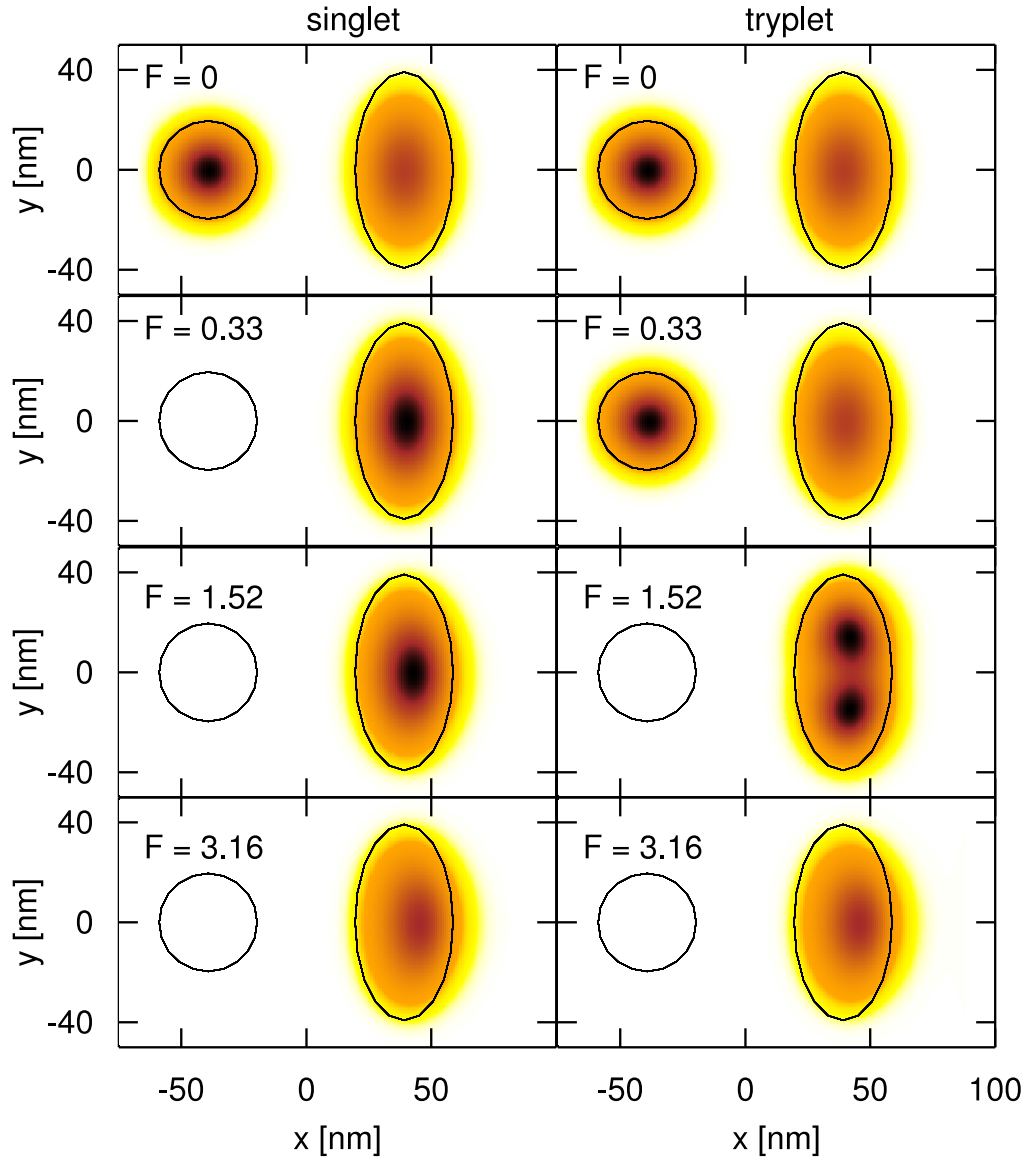
Wyniki prezentowane na rysunkach 4.8 – 4.11 pozwalają na obserwowanie zmian lokalizacji elektronów w układzie sprzężonych kropek kwantowych. Zmiany te są spowodowane działaniem zewnętrznego pola elektrycznego F . W przypadku braku pola elektrycznego, elektrony są zlokalizowane w różnych kropkach kwantowych, ich funkcje falowe się nie przekrywają i dlatego energia wymiany J jest równa zero (por. rys. 4.8a, 4.9a i 4.10, 4.11 dla $F = 0$). Jeżeli przyłożymy do układu zewnętrzne napięcie, elektron z lewej kropki może tunelować przez barierę potencjału pomiędzy kropkami do prawej kropki. W tym obszarze, pole elektryczne powoduje szybki liniowy wzrost energii wymiany J (por. rys. 4.8b i 4.9b). Warto w tym momencie zauważyć, że



Rysunek 4.9: Gęstość elektronowa w stanie trypletowym (ciągła linia czerwona) i profil potencjału uwięzienia wzdłuż osi x (niebieska przerywana linia). Zielone linie poziome pokazują poziomy jednoelektronowe, a czarna kropkowana krzywa pokazuje energię wymiany J . Parametry układu: $R_{lx} = R_{rx} = R_{ry} = 20$ nm, $R_{ly} = 40$ nm, $d = 80$ nm, $p = 10$.

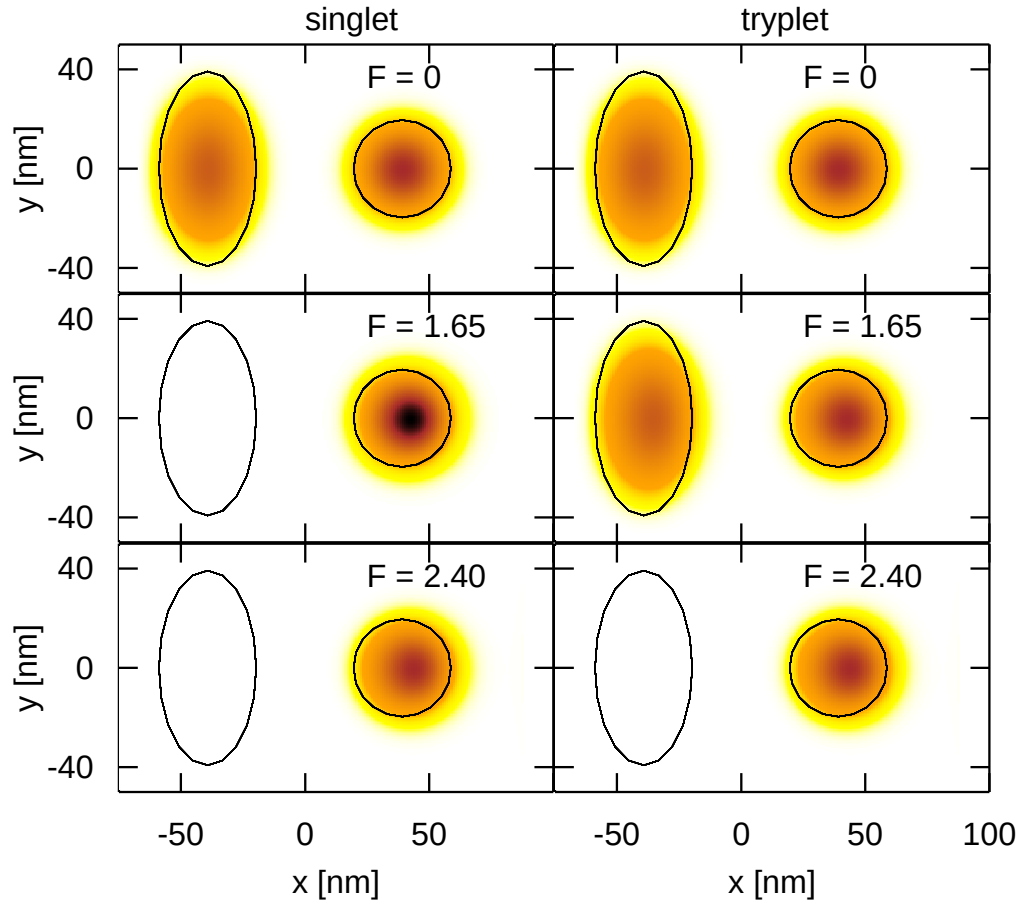
już dla słabych pól elektrycznych gęstość elektronowa w stanie singletowym znacznie się zmienia, natomiast w stanie trypletowym jest tylko nieznacznie zaburzona (por. rys. 4.10 i 4.11 dla $F = 0$ i $F = 0.33$ kV/cm). Jeżeli prawa kropka kwantowa jest dostatecznie duża, wzrastające pole elektryczne powoduje podwójne obsadzenie prawej kropki zarówno w stanie singletowym jak i trypletowym (por. rys. 4.8(c) i rys. 4.10 dla $F = 1.52$ kV/cm). W stanie singletowym elektrony zlokalizowane są w centralnym obszarze kropki, natomiast w stanie trypletowym gęstość elektronowa ma dwa maksima położone równolegle do osi y (por. rys. 4.10 dla $F = 1.52$ kV/cm).

W zakresie pośrednich pól elektrycznych energia wymiany J przyjmuje maksymalną wartość J_{max} . Podwójne obsadzenie prawej kropki utrzymuje się w dość szerokim zakresie pola elektrycznego, co skutkuje szerokim obszarem, w którym energia wymiany nie zależy (lub zależy słabo) od pola



Rysunek 4.10: Mapy gęstości elektronowych dla singletu i trypletu dla różnych wartości pola elektrycznego F (w kV/cm). Linie ciągłe przedstawiają rozmiary kropek kwantowych. Parametry układu: $R_{lx} = R_{rx} = R_{ly} = 20$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $d = 80$ nm, $p = 10$.

elektrycznego (por. rys. 4.2 i rys. 4.8). Jeżeli pole elektryczne jest większe od pewnej wartości krytycznej F_{c2} , jeden z elektronów w stanie trypletowym tuneluje poprzez prawą trójkątną barierę potencjału i zostaje zaabsorbowany w obszarze prawej elektrody, a energia wymiany gwałtownie spada do zera



Rysunek 4.11: Mapy gęstości elektronowych dla singletu i trypletu dla różnych wartości pola elektrycznego F (w kV/cm). Linie ciągłe przedstawiają zasięg potencjału uwięzienia. Parametry układu: $R_{lx} = R_{rx} = R_{ry} = 20$ nm, $R_{ly} = 40$ nm, $d = 80$ nm, $p = 10$.

(por. rys. 4.8(d) i 4.10 dla $F = 3.16$ kV/cm oraz 4.9(d) i 4.11 dla $F = 2.40$ kV/cm).

Kropkowane czerwone linie w prawej części rysunków 4.8(d) i 4.9(d) przedstawiają gęstość elektronową tuż po chwili, w której nastąpiło wytunelowanie elektronu z układu sprzężonych kropek kwantowych. Warto zwrócić uwagę na zmiany jednoelektronowych poziomów energetycznych E_ν (poziome zielone linie na rys. 4.8 i 4.9). Dla pola elektrycznego mniejszego od F_{c2} poziomy energetyczne leżą poniżej poziomu kontinuum, który jest wyznaczony przez potencjał elektrochemiczny prawej elektrody, czyli $\mu_r = -eV$. Poziomom tym odpowiadają stany związane elektronu. Dla $F = F_{c2}$ poziomy jedno-

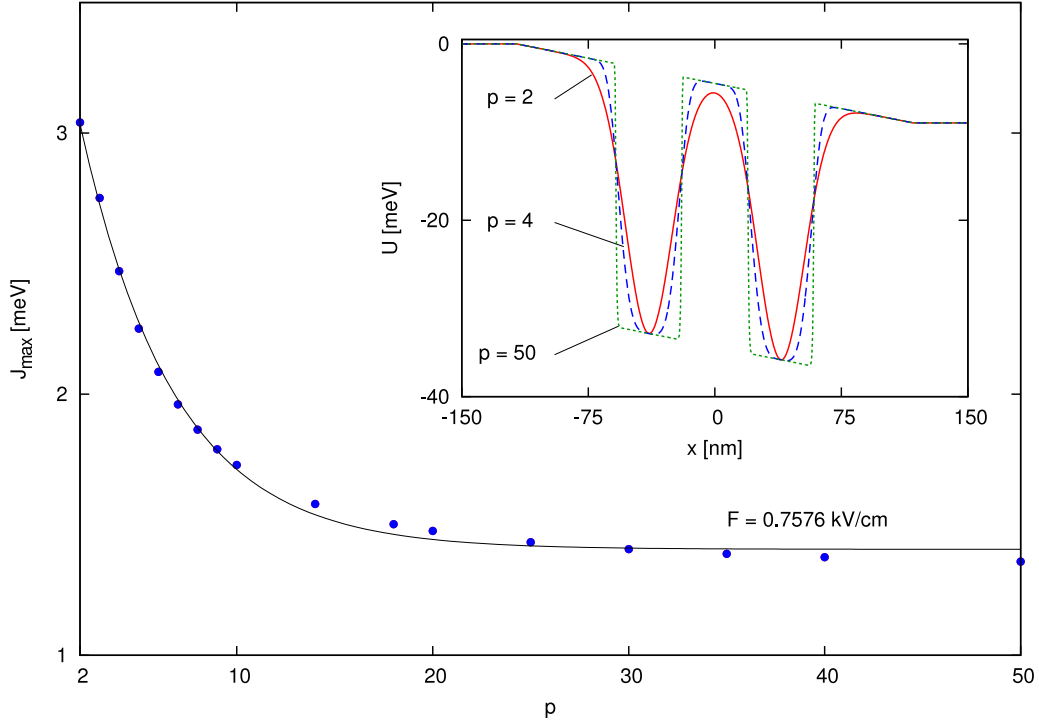
elektronowe osiągają granicę μ_r , a zatem w silnych polach elektrycznych, tworzą się stany rezonansowe. Tunelowanie elektronu z prawej kropki następuje z tych stanów rezonansowych przez prawą trójkątną barierę [por. rys. 4.8(d) i 4.9(d)] do obszaru prawej elektrody.

Dla nanoukładu, w którym lewa kropka jest większa od prawej (por. rys. 4.9 i 4.11), w obszarze słabych pól elektrycznych otrzymujemy podobne zachowanie jak dla układu z prawą kropką większą od lewej (por. rys. 4.8 i 4.10). W obszarze słabych pól, energia wymiany jest równa zero (dla $F \leq F_{c0}$), a następnie wzrasta liniowo wraz z polem elektrycznym dla $F_{c0} \leq F \leq F_{c1}$. Natomiast po osiągnięciu wartości maksymalnej J_{max} dla $F = F_{c1}$ energia wymiany gwałtownie spada do zera. Zależność ta jest różna od prezentowanych na rysunkach 4.2-4.4. Taka zależność $J(F)$ jest rezultatem nagłej zmiany lokalizacji elektronów dla $F = F_{c1}$. Dla $F \leq F_{c1}$ elektrony zlokalizowane są w różnych kropkach [por. rys. 4.9(b, c)]. Zwiększające się pole elektryczne nie powoduje podwójnego obsadzenia prawej kropki w stanie trypletowym, lecz prowadzi do natychmiastowego przetunelowania jednego z elektronów do obszaru prawej elektrody. Dla pola elektrycznego $F > F_{c1}$ prawa kropka nie może być podwójnie obsadzona, co skutkuje gwałtownym zerowaniem się energii wymiany. Rysunek 4.9(d) pokazuje także, że dla dostatecznie silnego pola elektrycznego F jednoelektronowe wzbudzone poziomy energetyczne leżą powyżej μ_r , a zatem tworzą się stany rezonansowe. Następuje rezonansowe tunelowanie poprzez pierwszy stan wzbudzony do obszaru prawej elektrody.

Rysunek 4.12 pokazuje zależność maksymalnej energii wymiany J_{max} od parametru twardości p potencjału uwięzienia. Dla układu, którego geometrię pokazuje wstawka do rysunku 4.2, dla pola elektrycznego $F \approx 0.76$ kV/cm można zauważyć, że wartość J_{max} maleje wraz ze wzrostem twardości potencjału. Zależność ta może być sparametryzowana funkcją eksponencjalną

$$J_{max}(p) = A_1 \exp(-C_1 p) + B_1, \quad (4.2)$$

gdzie $A_1 = 2.4740$ meV, $B_1 = 1.4059$ meV, a $C_1 = 0.2091$. Eksponencjalną zależność (4.2) można wytłumaczyć tym, że - przy ustalonym zasięgu potencjału uwięzienia - wraz ze wzrostem twardości potencjału wzrasta również efektywna pojemność kwantowa kropek (por. wstawka do rys. 4.12). Oznacza to, że elektrony uwięzione w prawej kropce stają się bardziej zdelokalizowane, a zatem mogą się bardziej oddalić od siebie, co prowadzi do eksponencjalnego zmniejszania się przekrywania elektronowych funkcji falowych.



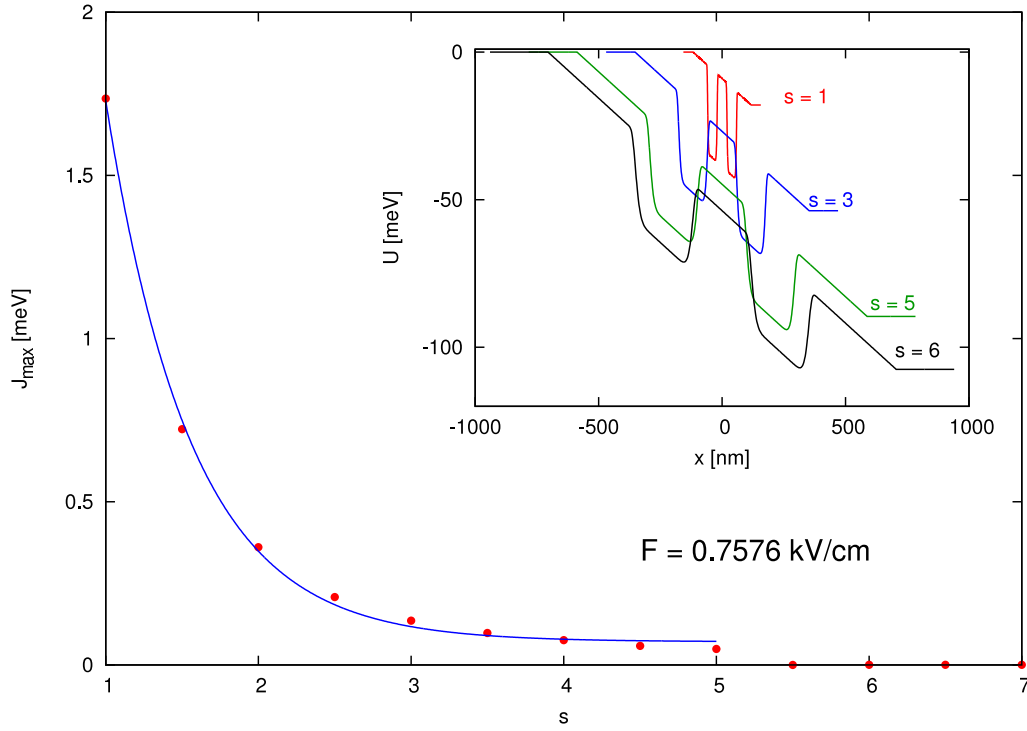
Rysunek 4.12: Maksymalna energia wymiany J_{max} w funkcji parametru p twardości potencjału uwięzienia dla ustalonego pola elektrycznego $F = 0.7576$ kV/cm. Niebieskie punkty pokazują wyniki obliczeń, linia ciągła - dopasowaną krzywą (4.2). Parametry układu: $R_{lx} = R_{ly} = R_{rx} = 20$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $d = 80$ nm, $p = 10$. Wstawka: energia potencjalna elektronu w funkcji x .

Z punktu widzenia eksperymentalnej realizacji nanoukładów dobrze jest znać zależność energii wymiany J od rozmiarów układu. W tym celu wyznaczona została zależność J_{max} w funkcji czynnika skalującego s dla układu, którego geometrię pokazuje wstawka do rysunku 4.2 dla pola elektrycznego $F \approx 0.76$ kV/cm. Czynniki skalujący zdefiniowany został jako $s = R_{actual}/R_{initial}$, czyli jest równy ilorazowi aktualnych rozmiarów przestrzennych układu (R_{actual}) do jego rozmiarów początkowych ($R_{initial}$). Jako układ początkowy przyjęto układ o rozmiarach przestrzennych: $R_{lx} = R_{ly} = R_{rx} = 20$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $d = 80$ nm i $p = 10$. Obliczenia energii wymiany zostały przeprowadzone dla kilkunastu nanoukładów, których parametry potencjału uwięzienia były odpowiednio przeskalowane przez czynnik skalujący, tzn. sR_{lx} , sR_{ly} , sR_{rx} , sR_{ry} i sd . Jednocześnie, aby utrzymać stałą wartość pola elektrycznego F przeskalowano także odległość pomiędzy elektrodami

$L \rightarrow sL$ oraz napięcie $V \rightarrow sV$. Wyniki obliczeń pokazane są na rysunku 4.13 (czerwone punkty). W przedziale $1 \leq s \leq 5$ można dokonać parametryzacji tej zależności za pomocą funkcji eksponencjalnej

$$J_{max}(s) = A_2 \exp(-C_2 s) + B_2, \quad (4.3)$$

gdzie $A_2 = 9.9040$ meV, $B_2 = 0.0710$ meV oraz $C_2 = 1.7874$ (por. linia ciągła na rys. 4.13). Zależność eksponencjalna (4.3), podobnie jak zależność (4.2) może być wyjaśniona biorąc pod uwagę efekty rozmiarowe. Wraz ze wzrostem rozmiarów całego nanoukładu (por. wstawka do rys. 4.13), maleje przekrywanie się elektronowych funkcji falowych, co prowadzi do eksponencjalnego spadku energii wymiany wraz ze wzrostem czynnika skalującego s . Należy zauważyć, że parametryzacja (4.3) jest poprawna tylko dla $s \leq 5$. Jeżeli roz-



Rysunek 4.13: Maksymalna energia wymiany J_{max} w funkcji czynnika skalującego s dla ustalonego pola elektrycznego $F = 0.7576$ kV/cm. Czerwone punkty prezentują wyniki obliczeń, linia ciągła - dopasowaną krzywą (4.3). Parametry początkowe układu: $R_{lx} = R_{ly} = 20$ nm, $R_{rx} = 20$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $d = 80$ nm, $p = 10$. Wstawka: energia potencjalna elektronu w funkcji x dla kilku wybranych wartości czynnika skalującego s .

miar nanoukładu jest większy od pewnej granicznej wartości ($s \simeq 5$), energia wymiany gwałtownie spada do zera. Ten zanik energii wymiany w dużych nanoukładach związany jest z silną delokalizacją elektronów, którą można wyjaśnić używając profili potencjału uwięzienia (por. wstawka do rys. 4.13). Aby utrzymać stałe pole elektryczne przy zwiększeniu rozmiarów układu s razy, należy przyłożyć s razy większe napięcie, co prowadzi do obniżenia potencjału elektrochemicznego prawej elektrody $\mu_r = -eV$. Jednocześnie jednoelektronowe poziomy energetyczne rosną względem μ_r . Dla $s \approx 5$ poziom energetyczny pierwszego stanu wzbudzonego leży powyżej potencjału elektrochemicznego prawej elektrody, co istotnie zwiększa prawdopodobieństwo przejścia elektronu przez trójkątną barierę potencjału z prawej kropki do prawej elektrody. W takich warunkach jeden z elektronów tuneluje z układu sprzężonych kropek kwantowych do obszaru prawej elektrody, co prowadzi do zerowania się energii wymiany J .

W zakresie słabych i pośrednich pól elektrycznych, nanoukłady złożone ze sprzężonych bocznie kropek kwantowych, posiadają ważną właściwość: energia wymiany J jest liniową funkcją pola elektrycznego [por. wzór (4.1)]. Zakres pola elektrycznego ΔF_{linear} , w którym ta liniowa zależność jest poprawna, zależy od geometrii układu i twardości potencjału uwięzienia. Dla nanoukładu z rys. 4.4 $\Delta F_{linear} \approx 0.8$ kV/cm dla potencjału o $p = 10$. Dla potencjału o takiej samej twardości, lecz różnej geometrii nanoukładu (por. rys. 4.2-4.4) $\Delta F_{linear} \approx 0.2$ kV/cm. Szerszy zakres zależności liniowej (większa wartość ΔF_{linear}) powoduje, że energia wymiany osiąga większą wartość J_{max} .

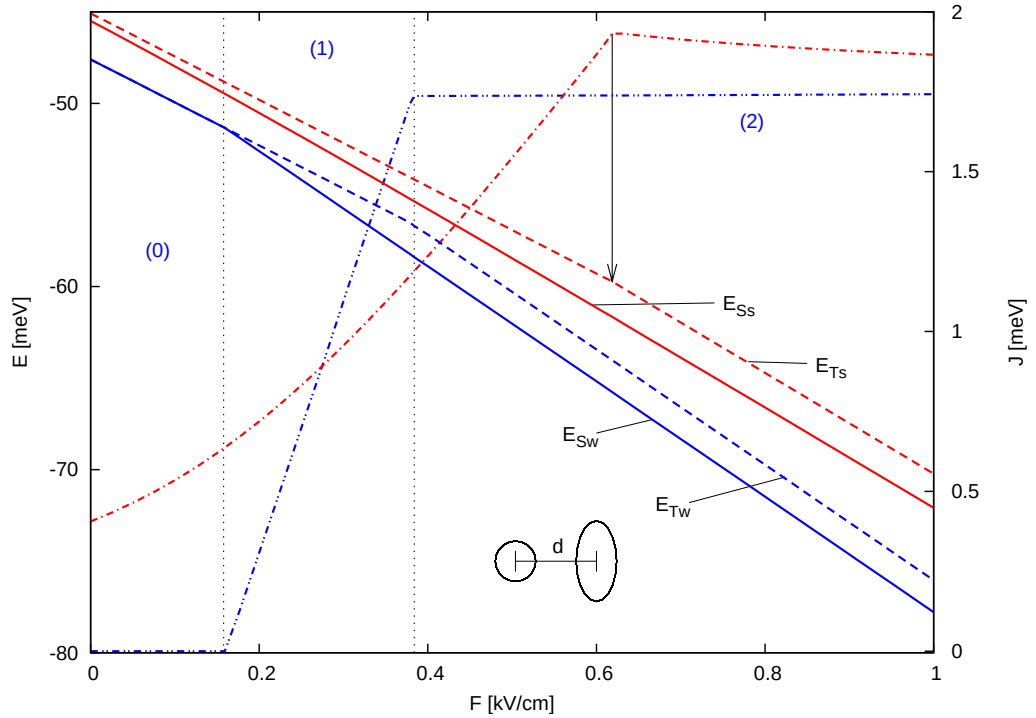
Aby wyjaśnić liniową zależność energii wymiany od pola elektrycznego, zbadano przebiegi najniższych poziomów energetycznych singletu i trypletu. Okazuje się, że zależność tych energii od pola elektrycznego w przedziale $0 \leq F \leq F_{c2}$ może być bardzo dokładnie sparametryzowana za pomocą funkcji liniowych (por. linie niebieskie na rys. 4.14), czyli

$$E_{S,T}^{(i)}(F) = \alpha_{S,T}^{(i)} F + \beta_{S,T}^{(i)}, \quad (4.4)$$

gdzie $i = 0, 1, 2$. Parametry $\alpha_S^{(i)}$, $\alpha_T^{(i)}$, $\beta_S^{(i)}$ oraz $\beta_T^{(i)}$ przyjmują różne wartości w różnych przedziałach pola elektrycznego, tzn. $[0, F_{c0}]$, $[F_{c0}, F_{c1}]$, $[F_{c1}, F_{c2}]$, które oznaczono odpowiednio (0), (1) i (2), lecz są niezależne od F w obrębie każdego z tych przedziałów. W zakresie niskich pól elektrycznych, tzn. dla $0 \leq F \leq F_{c0}$, otrzymano $\alpha_S^{(0)} = \alpha_T^{(0)}$ i $\beta_S^{(0)} = \beta_T^{(0)}$, co prowadzi do zerowania się

energii wymiany wskutek degeneracji singlet-tryplet. W zakresie pośrednich pól, tzn. dla $F_{c0} \leq F \leq F_{c1}$, degeneracja singlet-tryplet zostaje zniesiona. W tym przedziale $\alpha_S^{(1)} < \alpha_T^{(1)}$ i $\beta_S^{(1)} > \beta_T^{(1)}$. Otrzymujemy zatem $\alpha = \alpha_T^{(1)} - \alpha_S^{(1)} > 0$ i $\beta = \beta_T^{(1)} - \beta_S^{(1)} < 0$, co prowadzi do liniowej zależności $J(F)$ [por. wzór (4.1)].

Interesujący jest fakt, że dla nanourządzeń o schematach podanych na rysunkach 4.2 i 4.3 liniowa zależność (4.4) zachowuje ważność także w zakresie silniejszych pól elektrycznych, tzn. dla $F_{c1} \leq F \leq F_{c2}$. Wartości parametrów $\alpha_{S,T}^{(2)}$ i $\beta_{S,T}^{(2)}$ są różne od tych dla niższych pól, ale są w przybliżeniu stałe w przedziale (2). Otrzymujemy $\alpha_S^{(2)} \simeq \alpha_T^{(2)}$ i $\beta_T^{(2)} > \beta_S^{(2)}$, co prowadzi do sytuacji, w której energia wymiany nie zależy od pola elektrycznego $J_{max} \simeq \beta_T^{(2)} - \beta_S^{(2)} = \text{const.}$



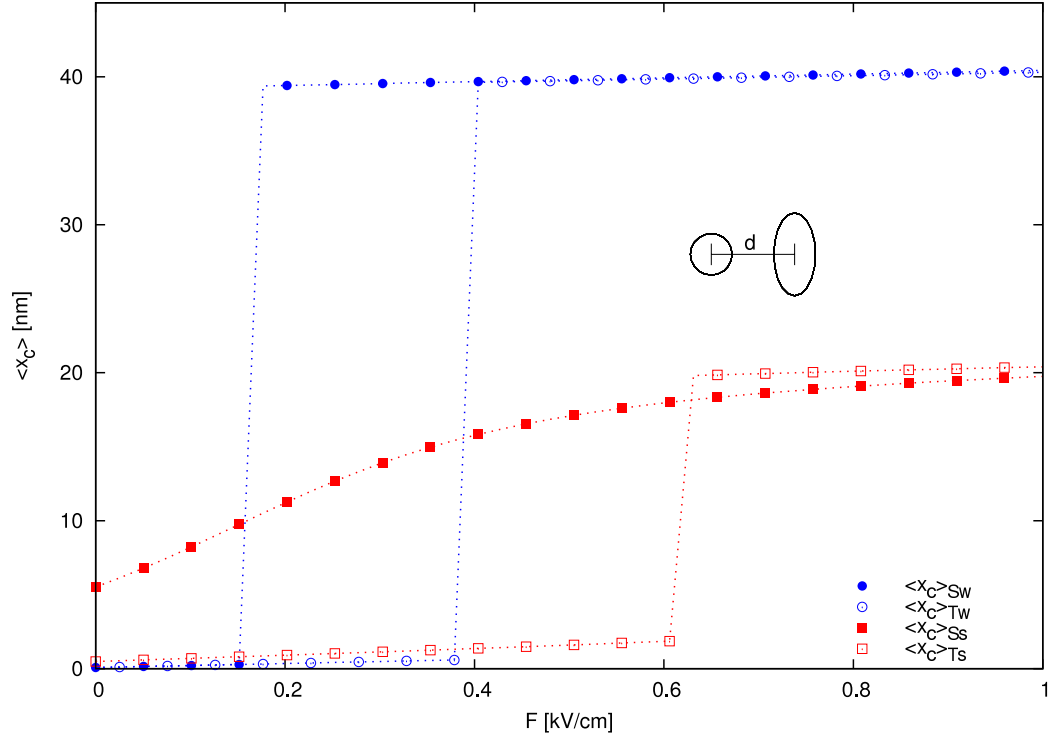
Rysunek 4.14: Energia stanu singletowego (E_{Sw}, E_{Ss}) i trypletowego (E_{Tw}, E_{Ts}) oraz energia wymiany J (linie przerywano-kropkowane) w funkcji pola elektrycznego F dla dwóch odległości d pomiędzy środkami kropek. Indeksy w i s oznaczają odpowiednio sytuację słabego ($d = 80$ nm, linie niebieskie) i silnego ($d = 40$ nm, linie czerwone) sprzężenia tunelowego. Parametry układu: $R_{lx} = R_{ly} = 20$ nm, $R_{rx} = 20$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $p = 10$.

Kolejną interesującą właściwością parametryzacji (4.1) jest to, że parametr $\alpha = \Delta J/\Delta F$, który określa nachylenie krzywej $J(F)$ w przedziale (1), przybiera te same wartości dla wszystkich rozważanych nanoukładów. W szczególności, parametr α nie zależy od twardości potencjału uwięzienia i geometrii nanoukładu (por. rys. 4.2-4.5). Biorąc pod uwagę wszystkie otrzymane zależności $J(F)$ dla różnych nanoukładów (por. rys. 4.2-4.5) obliczono

$$\alpha = 7.73 \pm 0.13 \text{ [meV/(kV/cm)]} .$$

W sprzężonych bocznie kropkach kwantowych, liniowa zależność $J(F)$ nie może być wyjaśniona na podstawie rachunku zaburzeń pierwszego rzędu [34]. Wynika to stąd, iż nawet słabe pole elektryczne powoduje znaczące zaburzenie gęstości elektronowej w stosunku do sytuacji bez pola (por. rys. 4.10 i 4.11). Ponadto okazuje się, że nawet dla nanoukładów o takiej samej geometrii i w tym samym polu elektrycznym liniowa zależność $J(F)$ znika, jeżeli istnieje silne sprzężenie tunelowe pomiędzy kropkami. W celu zobrazowania tego efektu rozważone zostały dwa układy o geometrii pokazanej na wstawce do rysunku 4.14. Na rysunkach 4.14 i 4.15 indeksy w i s oznaczają wyniki otrzymane dla słabego i silnego sprzężenia tunelowego pomiędzy kropkami kwantowymi. Na rysunku 4.14 pokazane są wyniki dla dwóch nanoukładów o tych samych zasięgach potencjału uwięzienia, różniących się jedynie odległością pomiędzy środkami kropek kwantowych. Dla układu o słabym sprzężeniu tunelowym ($d = 80$ nm) zarówno energia stanu singletowego, trypletowego jak i energia wymiany są liniowymi funkcjami pola elektrycznego (w odpowiednich przedziałach pola). Obserwujemy również załamania na zależności energii E_{T_w} od pola elektrycznego F , które prowadzą do odpowiednich załamania na krzywej $J(F)$. Dla silnego sprzężenia tunelowego ($d = 40$ nm) otrzymujemy całkowicie odmienną zależność $J(F)$. W tym przypadku energia stanu singletowego E_{S_s} nie jest liniową funkcją pola elektrycznego, co prowadzi do nieliniowej zależności $J(F)$. Jednakże energia stanu trypletowego E_{T_s} nadal pozostaje przedziałami liniową funkcją F z wyraźnym widocznym załamaniem (por. strzałka na rys. 4.14). W zakresie słabych pól elektrycznych i silnego sprzężenia tunelowego, degeneracja singlet-tryplet jest zniesiona i energia wymiany J ma wartość niezerową nawet dla $F = 0$ (por. rys. 4.14).

Pochodzenie liniowej/nieliniowej zależności $J(F)$ można zbadać rozważając zmianę położenia środka ładunku elektrycznego, tzn. $x_c = (x_1 + x_2)/2$.



Rysunek 4.15: Wartość oczekiwana $\langle x_c \rangle$ położenia środka ciężkości ładunku elektrycznego na osi x w funkcji pola elektrycznego F dla singletu S (pełne symbole) i trypletu T (puste symbole) dla $d = 40$ nm (indeks s , linie czerwone) i $d = 80$ nm (indeks w , linie niebieskie). Parametry układu takie same jak na rysunku 4.14.

Wyznaczona została wartość oczekiwana $\langle x_c \rangle$ dla przypadku słabego i silnego sprzężenia tunelowego dla singletu i trypletu. Zgodnie z równaniem (2.3), wartość $2\langle x_c \rangle$ jest zależnym od pola elektrycznego wkładem do energii potencjalnej każdego z elektronów. Rysunek 4.15 pokazuje, że $\langle x_c \rangle$ jest liniową funkcją F dla trypletu zarówno w przypadku słabego jak i silnego sprzężenia tunelowego oraz dla singletu, ale jedynie w przypadku słabego sprzężenia pomiędzy kropkami. Dla silnego sprzężenia pomiędzy kropkami kwantowymi zależność $\langle x_c \rangle_{SS}$ od pola elektrycznego F jest nieliniowa. Można zaobserwować także, że wartości oczekiwane $\langle x_c \rangle_{SW}$, $\langle x_c \rangle_{TW}$ i $\langle x_c \rangle_{TS}$ mają skoki dla określonych wartości pola elektrycznego. W niskich polach elektrycznych, środek ciężkości ładunku elektrycznego znajduje się blisko środka nanoukładu, tzn. $\langle x_c \rangle \approx 0$, zarówno dla singletu jak i trypletu, co wynika z pojedynczego obsadzenia obu kropek kwantowych. Wzrastające pole elektryczne nieznacz-

nie przesuwają $\langle x_c \rangle$ w stronę prawej kropki. Dla singletu, w polu elektrycznym $F = F_{c0}$ następuje zmiana lokalizacji elektronów: obydwa elektrony zostają zlokalizowane w prawej kropce. Jednakże dla trypletu, pojedyncze obsadzenie obydwu kropek utrzymuje się aż do pola elektrycznego $F = F_{c1}$. Dla $F > F_{c1}$ i słabego sprzężenia pomiędzy kropkami środek ciężkości ładunku elektrycznego znajduje się blisko środka prawej kropki zarówno dla singletu jak i trypletu (por. rys. 4.15). Dla słabego sprzężenia tunelowego lokalizacja elektronów w stanie singletowym prawie się nie zmienia w przedziale $F_{c0} < F < F_{c1}$. Natomiast dla silnego sprzężenia między kropkami $\langle x_c \rangle_{ss}$ rośnie nieliniowo wraz z polem elektrycznym poczynając od wartości niezerowej dla $F = 0$. W stanie trypletowym skok w zależności $\langle x_c \rangle_{Ts}$ dla $F = F_{c1}$ następuje w wyniku nagłej zmiany lokalizacji elektronów z pojedynczo do podwójnie obsadzonej prawej kropki kwantowej.

4.4 Podsumowanie

W rozdziale tym przedstawiono wyniki obliczeń [49, 55] wpływu pola elektrycznego na energię wymiany. W sposób bezpośredni wyznaczono wpływ statycznego jednorodnego pola elektrycznego wytwarzanego zazwyczaj przez elektrody źródła i drenu. W sposób pośredni, poprzez zmianę parametru twardości, zasięgu i głębokości potencjału uwięzienia, zbadano także wpływ pola niejednorodnego, wytwarzanego przez elektrody bramek [36, 37, 38].

Pokazano, że za pomocą pola elektrycznego można efektywnie sterować energią wymiany. Zwiększając (lub zmniejszając) napięcie źródło-dren, można włączać (lub wyłączać) energię wymiany. Wartości krytyczne pola elektrycznego, dla którego zachodzi to włączanie/wyłączanie zależą od parametru twardości potencjału uwięzienia. Znaleziono nanoukłady, w których energia wymiany J w szerokim zakresie pól elektrycznych nie zależy od pola elektrycznego F . W obszarze tym wartość energii wymiany jest maksymalna. Zatem włączanie/wyłączanie energii wymiany odbywa się pomiędzy wartościami 0 i J_{max} .

Pokazano, że w przypadku nanoukładów o słabym sprzężeniu tunelowym pomiędzy kropkami kwantowymi, energia wymiany J jest liniową funkcją pola elektrycznego (dla przedziału pośrednich pól elektrycznych). Wyniki obliczeń pokazują, że parametr $\alpha = \Delta J / \Delta F$, który określa nachylenie krzywej $J(F)$, przyjmuje stałą wartość dla szerokiej klasy nanoukładów zbudowanych

ze sprzężonych bocznie kropek kwantowych. Przedstawiono wyniki pokazujące, że silne sprzężenie tunelowe pomiędzy kropkami kwantowymi niszczy liniową zależność $J(F)$.

Otrzymane w tym rozdziale wyniki mogą zostać wykorzystane do projektowania nanourządzeń półprzewodnikowych, w których wszystkie operacje związane z manipulacją spinem elektronu wykonywane są przy użyciu pola elektrycznego.

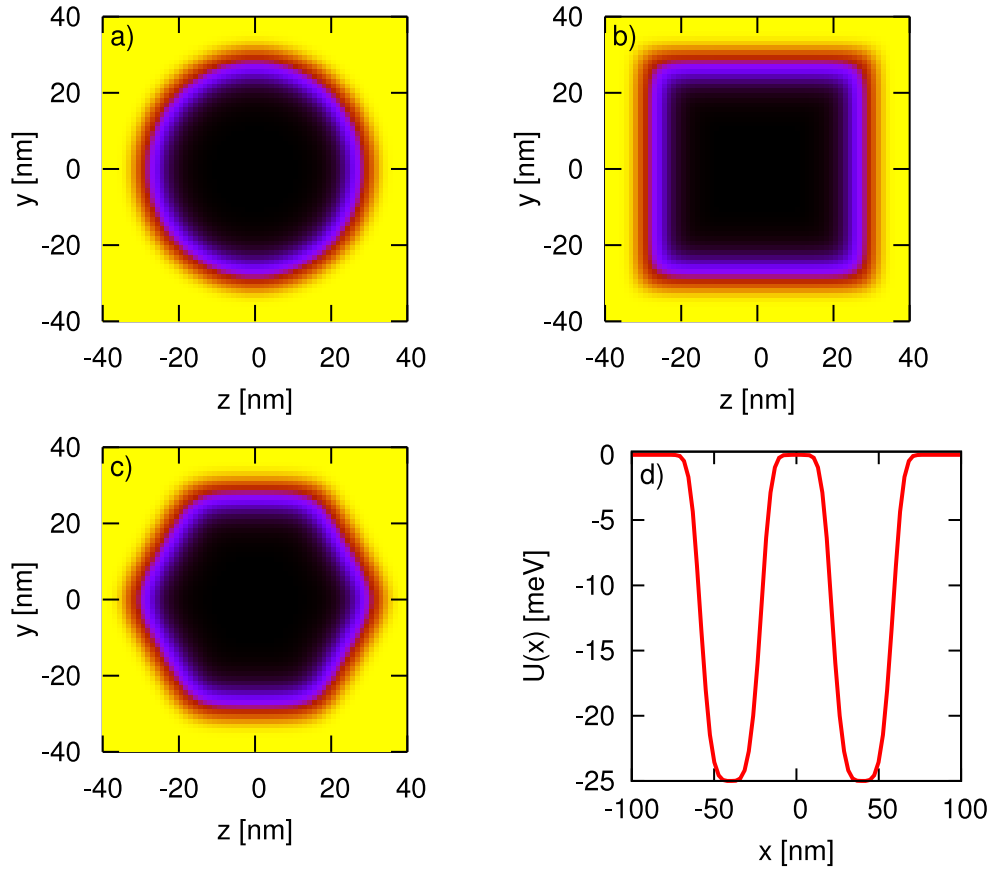
Rozdział 5

Oddziaływanie wymienne w trójwymiarowym modelu sprzężonych kropek w drucie kwantowym

W rozdziale tym przedstawione zostały wyniki obliczeń oddziaływania wymiennego w trójwymiarowym modelu sprzężonych bocznie kropek kwantowych. Model ten może służyć do opisu realizowanego eksperymentalnie układu sprzężonych kropek kwantowych wytworzonych w drucie kwantowym InAs [15, 50]. W zależności od metody wytwarzania drutów kwantowych można otrzymać druty o różnym przekroju poprzecznym, np. wytwarzane metodą MBE druty kwantowe [15, 50] posiadają przekrój sześciokątny. W rozdziale tym zbadano wpływ zewnętrznego pola elektrycznego na oddziaływanie wymienne w drutach kwantowych o różnym przekroju poprzecznym: kołowym, kwadratowym oraz sześciokątnym. Dla drutu o przekroju kołowym wykonano obliczenia zależności energii wymiany od parametru twardości potencjału uwięzienia poprzecznego $p_{\perp}$ oraz podłużnego $p_{\parallel}$.

5.1 Schemat układu

Rozważony został układ dwóch elektronów związanych w sprzężonych kropkach kwantowych wytworzonych w drucie kwantowym. Do obliczeń przyjęto potencjał uwięzienia w postaci (2.13). Taka parametryzacja pozwala na wy-

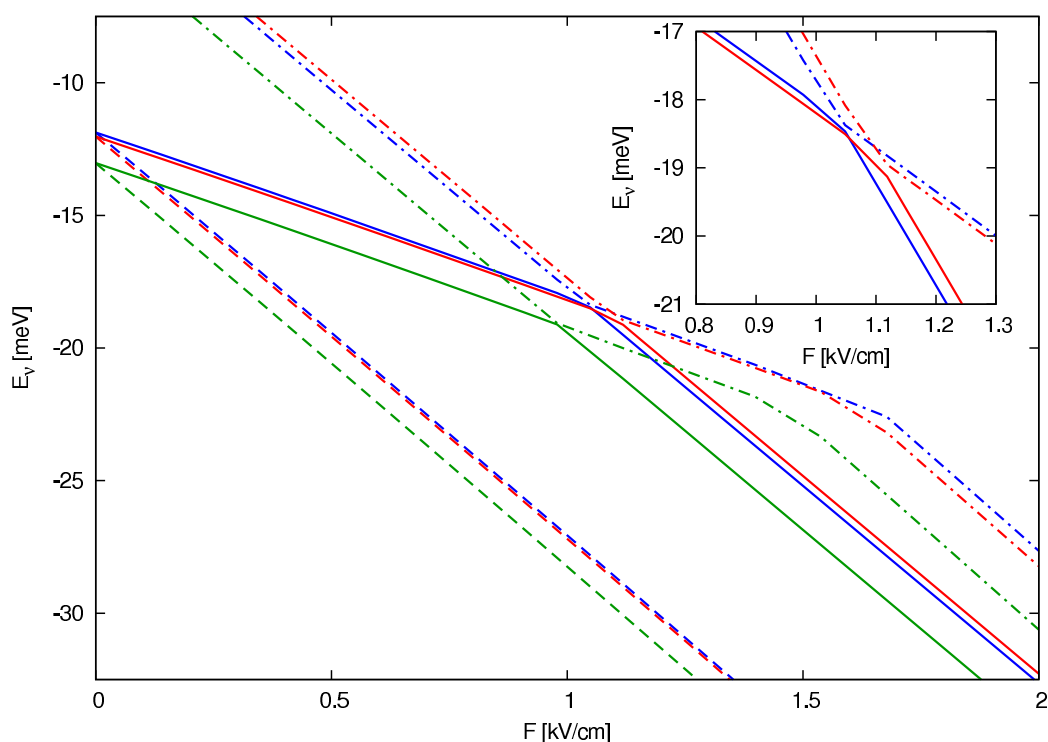


Rysunek 5.1: Kontury potencjału uwięzienia w płaszczyźnie prostopadłej do osi drutu dla potencjału a) kołowego, b) kwadratowego, c) sześciokątnego. d) Profil potencjału uwięzienia wzdłuż osi drutu. Odległość pomiędzy środkami potencjału uwięzienia wynosi $d = 90$ nm, parametry twardości potencjału: $p_{\perp} = 4$ i $p_{\parallel} = 10$.

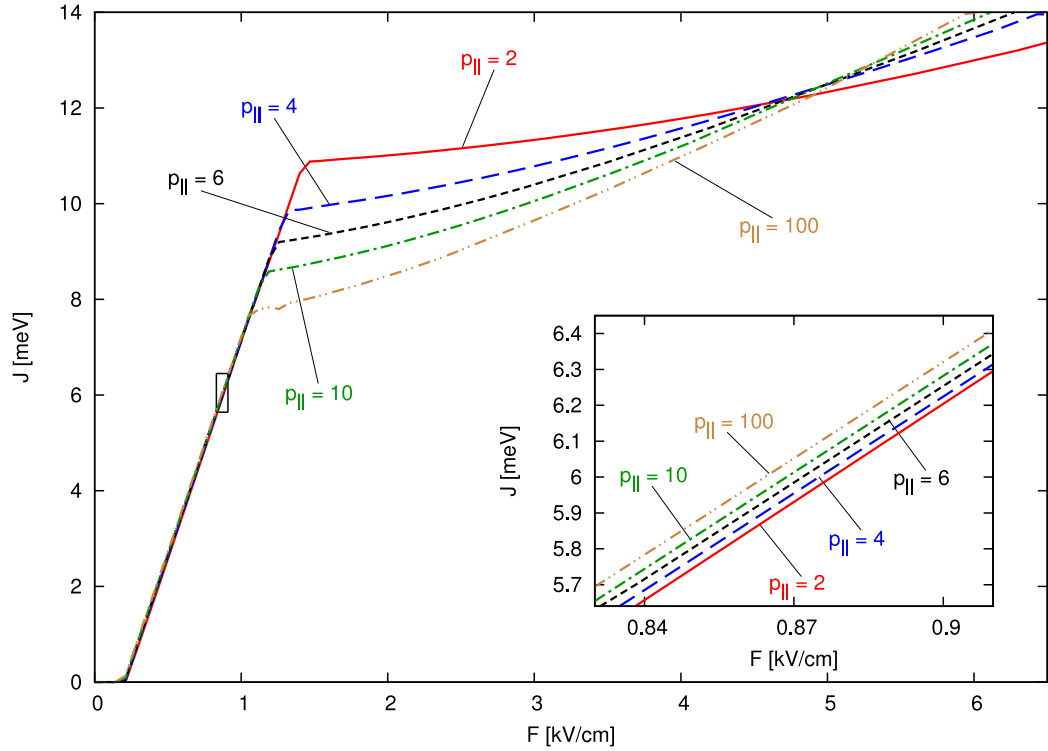
konanie obliczeń dla potencjałów o różnej twardości w kierunku osi drutu i w płaszczyźnie prostopadłej do osi. Rysunek 5.1 pokazuje przyjęte w obliczeniach przekroje poprzeczne potencjału uwięzienia: a) kołowy, b) kwadratowy, c) sześciokątny. Rysunek 5.1(d) przedstawia profil potencjału uwięzienia wzdłuż osi drutu kwantowego. Obliczenia zostały wykonane dla drutów InAs o średnicy ~ 50 nm, czyli dla zasięgów potencjału $R_y = R_z = 25$ nm oraz $R_{lx} = R_{rx} = 30$ nm w kierunku osi drutu kwantowego. W obliczeniach przyjęto stałe materiałowe InAs: $\varepsilon_s = 14.6$, $m_e = 0.023m_{e0}$, gdzie m_{e0} jest masą spoczynkową elektronu.

5.2 Wyniki

Rysunek 5.2 pokazuje energie E_ν trzech pierwszych stanów jednoelektronowych dla drutu o przekroju poprzecznym a) kołowym (linie niebieskie), b) sześciokątnym (linie czerwone) i c) kwadratowym (linie zielone). Należy zwrócić uwagę na wpływ kształtu przekroju poprzecznego potencjału na położenie poziomów jednoelektronowych. Zmiana potencjału uwięzienia z kołowego na sześciokątny w niewielkim stopniu obniża energię stanu podstawowego. Jest to związane z nieznaczną zmianą pojemności kwantowej układu. Natomiast w przypadku zmiany kształtu potencjału z kołowego lub sześciokątnego na kwadratowy, następuje dość znaczne obniżenie energii jednoelektronowych. Wynika to stąd, iż w przypadku potencjału o przekroju kwadratowym pojemność kwantowa układu kropek kwantowych jest większa (por. rys. 5.1), a zatem elektrony są silniej związane w układzie. Rysunek 5.2 pokazuje także,



Rysunek 5.2: Energie trzech najniższych poziomów jednoelektronowych dla drutów o przekroju poprzecznym kołowym (linie niebieskie), sześciokątnym (linie czerwone) i kwadratowym (linie zielone). Wstawka: powiększony obszar odpychania się poziomów energetycznych.



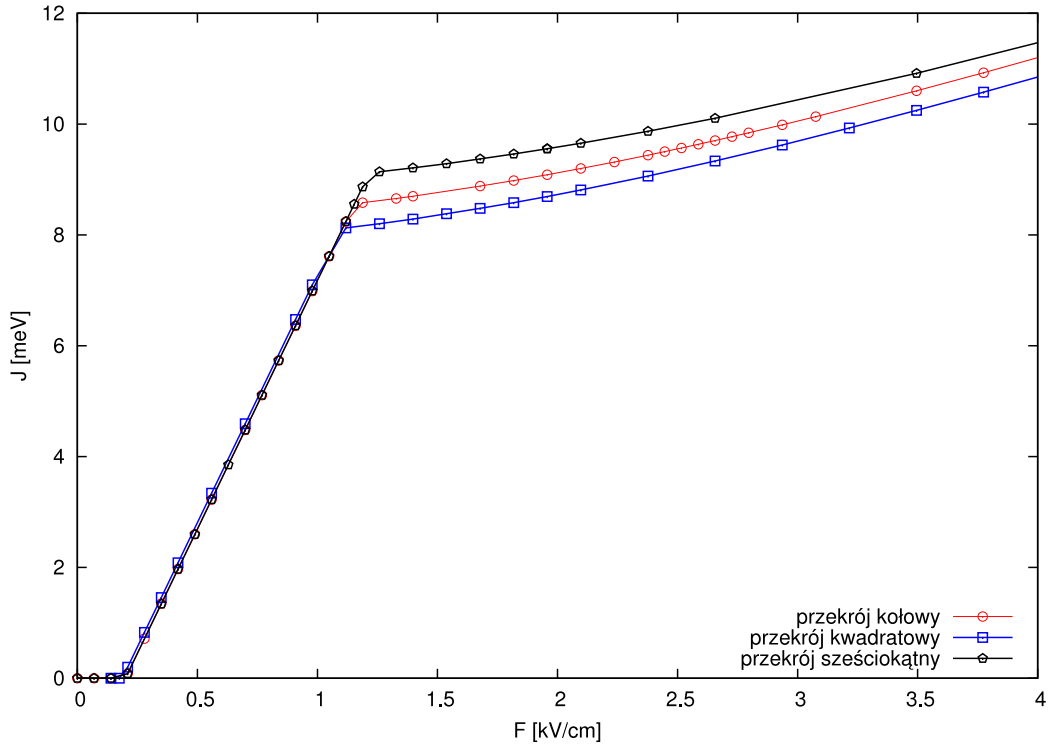
Rysunek 5.3: Energia wymiany J w funkcji pola elektrycznego F dla drutu kwantowego o kołowym przekroju poprzecznym dla różnej twardości potencjału uwięzienia działającego wzdłuż osi drutu. Wstawka: energia wymiany w funkcji pola elektrycznego dla potencjałów o różnej twardości w obszarze liniowego wzrostu. $R_y = R_z = 25$ nm, $R_{lx} = R_{rx} = 30$ nm, $p_{\perp} = 20$.

że dla pewnych wartości pola elektrycznego następuje odpychanie się jednoelektronowych poziomów energetycznych stanów wzbudzonych.

Rysunek 5.3 pokazuje obliczoną energię wymiany w funkcji pola elektrycznego działającego wzdłuż osi drutu dla drutu kwantowego o przekroju kołowym i parametrze twardości potencjału poprzecznego $p_{\perp} = 20$. Przedstawiono wyniki dla potencjałów o różnej twardości potencjału wzdłuż osi drutu: od miękkiego potencjału gaussowskiego ($p_{\parallel} = 2$) do twardego potencjału ($p_{\parallel} = 100$). Ze względu na symetrię potencjału w kierunku osi drutu [por. rys. 5.1(d)], w przypadku braku pola elektrycznego stany singletowe i trypletowe są zdegenerowane, co prowadzi do zerowania się energii wymiany J . Degeneracja ta zostaje zniesiona przez zewnętrzne pole elektryczne. Po przekroczeniu pewnego pola elektrycznego F_{c0} następuje liniowy wzrost energii wymiany. Elektrony w stanie singletowym zlokalizowane są w pra-

wej kropce kwantowej, natomiast w stanie trypletowym następuje stopniowe przelewanie ładunku elektrycznego z lewej kropki do prawej. Po przekroczeniu pola elektrycznego F_{c1} oba elektrony, zarówno w stanie singletowym jak i trypletowym zlokalizowane są w prawej kropce kwantowej. W tym przypadku układ sprzężonych kropek działa jak pojedyncza kropka kwantowa [55]. Wartość pola elektrycznego F_{c0} , przy której zaczyna się liniowy wzrost energii wymiany, zależy od parametru twardości potencjału uwięzienia $p_{\parallel}$. Przy ustalonych pozostałych parametrach nanoukładu wzrost $p_{\parallel}$ powoduje zwiększenie efektywnego rozmiaru kropek i jednocześnie zmniejsza się szerokość bariery pomiędzy kropkami, co powoduje, że prawdopodobieństwo tunelowania z lewej kropki do prawej jest największe dla potencjału o największej wartości parametru $p_{\parallel}$.

Rysunek 5.4 pokazuje zależność energii wymiany od pola elektrycznego dla sprzężonych kropek kwantowych w drucie o różnym przekroju poprzecznym. Zmiana przekroju poprzecznego potencjału z kołowego na kwadratowy



Rysunek 5.4: Energia wymiany J w funkcji pola elektrycznego dla potencjałów o różnym przekroju poprzecznym: kołowym (linia czerwona), sześciokątnym (linia czarna) i kwadratowym (linia niebieska). $p_{\perp} = 20$, $p_{\parallel} = 10$.

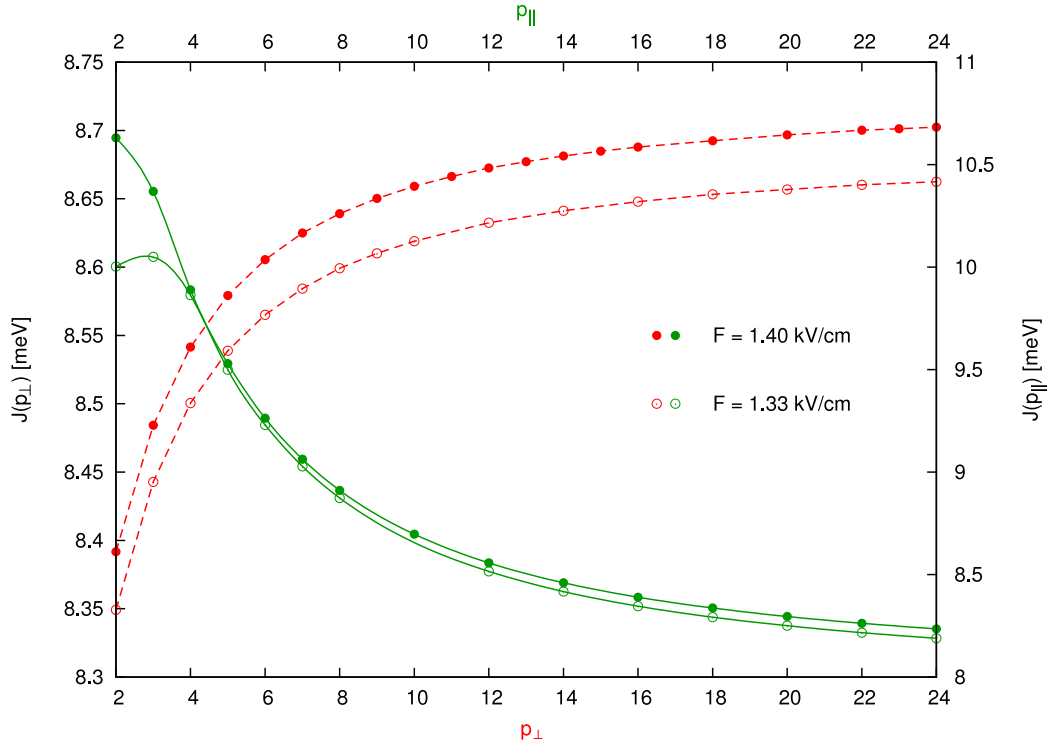
powoduje zmniejszenie energii wymiany. Jest to związane z tym, że w przypadku kwadratowego przekroju poprzecznego zwiększa się efektywny rozmiar kropek kwantowych (por. rys. 5.1), co skutkuje zmniejszeniem przekrywania się funkcji falowych elektronów i w rezultacie prowadzi do zmniejszenia energii wymiany J .

Wyniki przedstawione na rysunkach 5.3 i 5.4 pokazują, że dla słabych i pośrednich pól elektrycznych zależność energii wymiany od pola elektrycznego może być sparametryzowana za pomocą funkcji liniowej

$$J(F) = \alpha F + \beta . \quad (5.1)$$

Podobnie jak dla układów dwuwymiarowych, parametr β zależy od twardości potencjału $p_{\parallel}$ i wzrasta wraz z nim. Wyniki przeprowadzonych obliczeń pokazują natomiast, że parametr α nie zależy ani od $p_{\parallel}$, ani od przekroju poprzecznego drutu, w którym wytworzony jest układ sprzężonych kropek kwantowych. Wyznaczona na podstawie wszystkich wyników średnia wartość parametru α wynosi $\alpha = 8.93 \text{ meV}/(\text{kV}/\text{cm})$. Dla porównania w przypadku dwuwymiarowym $\alpha = 7.73 \text{ meV}/(\text{kV}/\text{cm})$.

Rysunek 5.5 pokazuje zależność energii wymiany J od parametrów twardości potencjału uwięzienia poprzecznego $p_{\perp}$ i podłużnego $p_{\parallel}$ dla dwóch wartości pola elektrycznego. Zależność energii wymiany od $p_{\parallel}$ (ciągłe zielone linie), podobnie jak dla układów dwuwymiarowych, jest malejącą funkcją parametru $p_{\parallel}$. Wzrost twardości potencjału uwięzienia prowadzi do zwiększenia efektywnego rozmiaru kropek kwantowych i zmniejszenia się przekrywania funkcji falowych elektronów, co w rezultacie prowadzi do zmniejszenia energii wymiany. Inny charakter zależności $J(p_{\parallel})$ dla mniejszego pola elektrycznego ($F = 1.33 \text{ kV}/\text{cm}$) związany jest z tym, że energia wymiany nie osiągnęła jeszcze swojej maksymalnej wartości (jest to jeszcze obszar liniowego wzrostu). Zmiana parametru $p_{\parallel}$ z wartości $p_{\parallel} = 2$ do wartości $p_{\parallel} = 24$ powoduje zmniejszenie energii wymiany o około 2.4 meV . Energia wymiany jest natomiast rosnącą funkcją parametru $p_{\perp}$. Dla $p_{\perp} > 20$ funkcja $J(F)$ dąży do asymptoty poziomej. Wydaje się, że przy ustalonej twardości potencjału uwięzienia podłużnego ($p_{\parallel} = 10$) pomimo wzrostu efektywnego rozmiaru kropek kwantowych wraz ze wzrostem parametru twardości $p_{\perp}$ potencjału uwięzienia poprzecznego, większy wpływ na energię wymiany ma silniejsza lokalizacja elektronów w kierunkach prostopadłych do osi drutu kwantowego (większa twardość potencjału $p_{\perp}$ oznacza mniejsze prawdopodobieństwo



Rysunek 5.5: Energia wymiany J w funkcji parametrów twardości potencjału uwięzienia $p_{\perp}$ (linie czerwone) i $p_{\parallel}$ (linie zielone) dla dwóch wartości pola elektrycznego.

wnikania funkcji falowej elektronów w obszar bariery potencjału). Zmiana parametru $p_{\perp}$ z wartości $p_{\perp} = 2$ do wartości $p_{\perp} = 24$ powoduje wzrost energii wymiany o około 0.3 meV. W porównaniu do odpowiedniej zmiany zależności $J(p_{\parallel})$ widać, że jest to efekt słabszy.

5.3 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale przedstawione zostały pierwsze wyniki obliczeń energii wymiany w trójwymiarowym układzie sprzężonych kropek kwantowych wytworzonych w drutach kwantowych o różnych przekrojach poprzecznych.

Przedstawione wyniki pokazują, że zmiana kształtu potencjału poprzecznego uwięzienia elektronów z kołowego na sześciokątny lub kwadratowy prowadzi do obniżenia energii stanu podstawowego pojedynczego elektronu. Zmiana kształtu potencjału poprzecznego uwięzienia elektronów z kołowego na

kwadratowy prowadzi do zmniejszenia energii wymiany. Jest to spowodowane zwiększeniem efektywnych rozmiarów kropek kwantowych, co skutkuje zmniejszeniem całki przekrywania i spadkiem wartości energii wymiany. Otrzymana została jakościowo różna zależność energii wymiany J od twardości potencjału uwięzienia poprzecznego $p_{\perp}$ oraz twardości potencjału wzdłuż osi drutu kwantowego $p_{\parallel}$. J jest rosnącą funkcją $p_{\perp}$, natomiast zależność $J(p_{\parallel})$ jest malejąca.

Przedstawione wyniki pokazują, że podobnie jak w przypadku układów dwuwymiarowych, energia wymiany $J(F)$ może być sparametryzowana funkcją liniową. Współczynnik α nachylenia krzywej $J(F)$ nie zależy od twardości potencjału uwięzienia ani od kształtu przekroju poprzecznego drutu. Należy zauważyć, że odpowiednie zależności $J(F)$ i $J(p_{\parallel})$ są jakościowo podobne do zależności prezentowanych w rozdziale 5 dla przypadku dwuwymiarowego. Różnice pomiędzy układami 2D i 3D wynikają głównie z tego, że rozważany w tym rozdziale model nanoukładu (sprężonych kropek kwantowych w drucie kwantowym) nie stanowi prostego uogólnienia modelu bocznie sprężonych kropek kwantowych rozważanego w rozdziale 5.

Podsumowując pokazano, w jaki sposób można za pomocą pola elektrycznego sterować oddziaływaniem wymiennym w kropkach kwantowych wytworzonych w drucie kwantowym.

Rozdział 6

Bramka logiczna XOR na spinach elektronów

W rozdziale tym przedstawiono propozycję realizacji bramki logicznej XOR w oparciu o układ poczwórnych sprzężonych bocznie kropek kwantowych [56]. W układzie tym istnieje możliwość niezależnego sterowania parametrami poszczególnych kropek kwantowych poprzez przyłożenie odpowiednich napięć do elektrod bramek [40]. Przedstawiona propozycja realizacji operacji logicznej XOR powstała na bazie wyników obliczeń dotyczących zależnej od spinu lokalizacji elektronów otrzymanych w poprzednich rozdziałach.

Teoria obliczeń kwantowych bazuje na pracy Barenco *et al.*, którzy pokazali, że zbiór wszystkich jednokubitowych bramek kwantowych i dwukubitowej bramki CNOT stanowi zbiór uniwersalnych bramek logicznych [57], czyli za pomocą odpowiedniej kombinacji bramek logicznych z tego zbioru można wykonać dowolną operację logiczną [58, 59]. Bramka CNOT stanowi kwantowy odpowiednik klasycznej bramki XOR.

W rozdziale tym zostanie omówiona propozycja klasycznej bramki XOR na spinach elektronów uwieczonych w układzie poczwórnych sprzężonych kropek kwantowych. W szczególności zostanie wyznaczony zakres parametrów nanourządzenia, dla których powinno ono wykonywać operację XOR. Zaletą zaproponowanego nanoukładu jest to, że wszystkie operacje związane z ewolucją układu kwantowego i odczytem stanu końcowego kontrolowane są za pomocą pola elektrycznego. Dodatkowo, po zdefiniowaniu stanu wyjściowego, proponowany układ może realizować operację logiczną XNOR na spinach elektronów.

a)

X	Y	Z
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

b)

X	Y	Z
0	0	1
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Tabela 6.1: Tabela prawdy bramki logicznej a) XOR i b) XNOR.

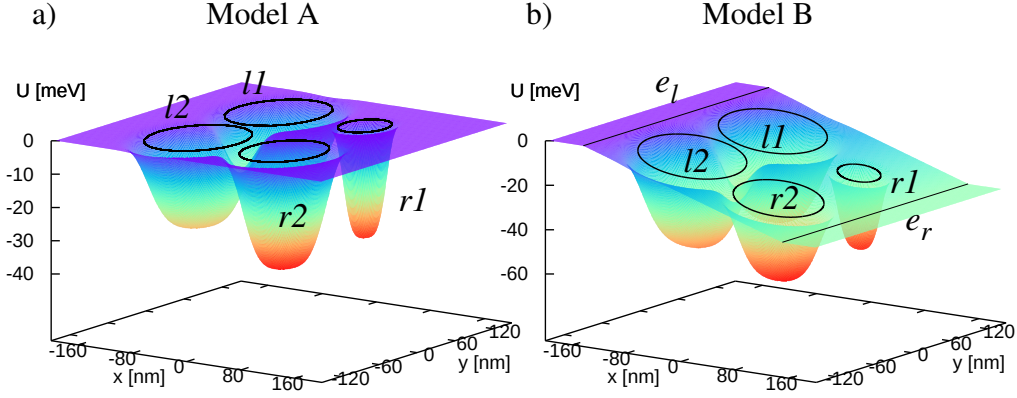
6.1 Bramki logiczne

Bramki logiczne realizują elementarne funkcje logiczne, których argumenty (zmiennne logiczne) i sama funkcja mogą przybierać tylko jedną z dwóch wartości: **0** (FALSE) lub **1** (TRUE). Argumenty funkcji logicznych zostały oznaczone literami X i Y , natomiast wartość funkcji literą Z (por. tabela 6.1).

Bramka logiczna XOR realizuje operację alternatywy wykluczającej (suma modulo 2). Na wyjściu bramki XOR otrzymujemy **1** wtedy i tylko wtedy, gdy obydwa wejścia są w różnych stanach logicznych, w przeciwnym przypadku na wyjściu otrzymujemy **0**. Bramka logiczna XNOR wykonuje operację logiczną negacji alternatywy wykluczającej ($\text{XNOR} \equiv \text{NOT}(\text{XOR})$). Tabelę prawdy bramek XOR i XNOR przedstawia Tabela 6.1. W proponowanym w tym rozdziale nanourządzeniu za zmienne logiczne X i Y (wejście bramki logicznej) przyjęto z -ową składową spinu elektronów.

6.2 Modele nanourządzenia

Rozważone zostały dwa modele nanourządzenia zbudowanego ze sprzężonych bocznie kropek kwantowych o różnych parametrach (rozmiarach geometrycznych i głębokości studni potencjału). **Model A** opisuje układ czterech sprzężonych bocznie kropek kwantowych, natomiast **model B** opisuje układ o takich samych parametrach umieszczony w zewnętrznym polu elektrycznym. Energię potencjalną elektronu w układzie czterech sprzężonych bocznie kropek kwantowych pokazuje rysunek 6.1. W sposób schematyczny zaznaczono zasięgi i rozmieszczenie poszczególnych kropek kwantowych ($l1$, $l2$, $r1$, $r2$) oraz ich położenie względem elektrod e_l , e_r , będących źródłem zewnętrznego pola elektrycznego $\mathbf{F} = (-F, 0, 0)$. Potencjał uwięzienia przyjęto jako su-



Rysunek 6.1: Energia potencjalna elektronu w układzie czterech sprzężonych bocznie kropek kwantowych a) bez zewnętrznego pola elektrycznego i b) w zewnętrznym polu elektrycznym $F = 1.01$ kV/cm. Schematycznie zaznaczono zasięgi i rozmieszczenie poszczególnych kropek kwantowych oraz dodatkowych elektrod e_l i e_r .

mę czterech potencjałów (2.1) o różnych zasięgach i środkach umieszczonych w wierzchołkach kwadratu (por. rys. 6.1). Potencjał uwięzienia ma postać

$$U_{4QD}(\mathbf{r}) = - \sum_{\mu\nu} U_{0\mu\nu} \exp\{ -[(x \pm x_{0\mu\nu})^2/R_{\mu\nu x}^2 + (y \pm y_{0\mu\nu})^2/R_{\mu\nu y}^2]^{p/2} \}, \quad (6.1)$$

gdzie $\mu = l$ dla kropek kwantowych położonych blisko elektrody e_l (lewej) i $\mu = r$ dla kropek położonych blisko elektrody e_r (prawej), wskaźnik $\nu = 1, 2$ rozróżnia kropki kwantowe o takim samym wskaźniku μ (por. rys. 6.1), $U_{0\mu\nu}$ jest głębokością studni potencjału, $R_{\mu\nu x}$ ($R_{\mu\nu y}$) zasięgiem potencjału w kierunku x (y), a $(x_{0\mu\nu}, y_{0\mu\nu})$ definiuje położenie środków kropek kwantowych. W nanourządzeniu B każdy z elektronów posiada dodatkową energię potencjalną $\Delta U(x)$ daną wzorem (2.3), pochodzącą od zewnętrznego pola elektrycznego $\mathbf{F}$. W nanourządzeniu A dodatkowa energia potencjalna $\Delta U(x) = 0$.

Obliczenia zostały wykonane dla parametrów materiałowych GaAs, dla którego promień donorowy ma wartość $a_D = 9.79$ nm, a rydberg donorowy wynosi $\mathcal{R}_D = 5.93$ meV. Wszystkie prezentowane w tym rozdziale wyniki uzyskano dla układu kwantowego o ustalonych parametrach lewych kropek kwantowych: $U_{0l1} = U_{0l2} = 6.4 \mathcal{R}_D \approx 38.0$ meV i $R_{l1} = R_{l2} = 6 a_D \approx$

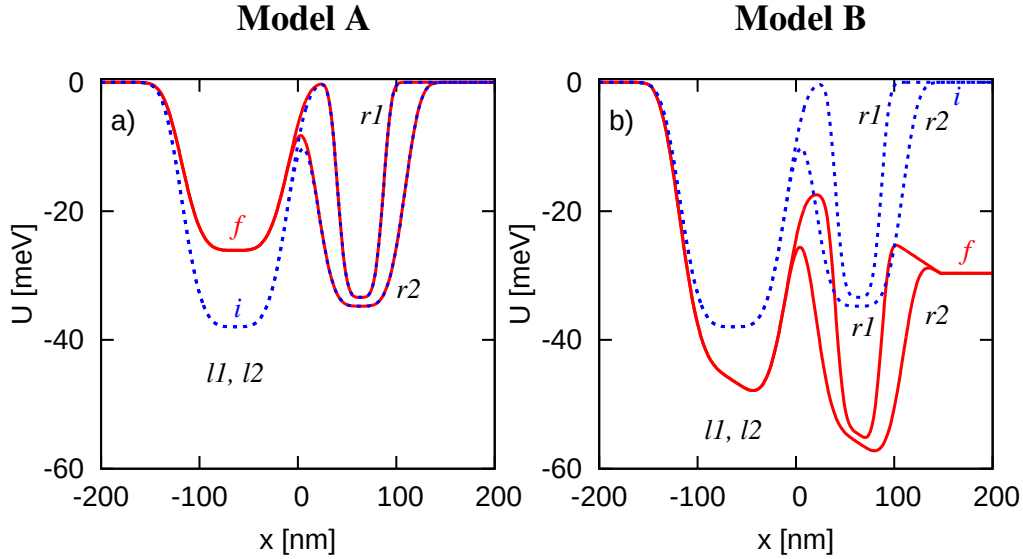
58.7 nm. Środki kropek kwantowych znajdują się w wierzchołkach kwadratu o boku 127.3 nm. Parametry kropek kwantowych r_1 i r_2 dobrano w taki sposób, aby zapewnić poprawne działanie nanoukładu. Przyjęto następujące wartości: $U_{0r_2} = 5.86 \text{ } \mathcal{R}_D \approx 34.8 \text{ meV}$, $U_{0r_1} = 5.63 \text{ } \mathcal{R}_D \approx 33.4 \text{ meV}$, $R_{r_2} = 5 \text{ } a_D \approx 49.0 \text{ nm}$ oraz $R_{r_1} = 2.6 \text{ } a_D \approx 25.5 \text{ nm}$. We wszystkich obliczeniach w tym rozdziale parametr twardości potencjału miał wartość $p = 4$. Problem jednoelektronowy z potencjałem (6.1) został rozwiązany metodą wariacyjną przy użyciu wielocentrowych gaussianów, a problem dwuelektronowy metodą mieszania konfiguracji z 64 wyznacznikami Slatera (2.7).

6.3 Realizacja operacji logicznej

Operacja logiczna wykonywana jest na układzie dwóch elektronów uwięzionych w poczwórnej kropce kwantowej. Realizacja operacji logicznej XOR odbywa się w trzech etapach: (1) preparacja stanu początkowego, (2) ewolucja układu kwantowego, (3) odczyt stanu końcowego.

W stanie początkowym elektrony zlokalizowane są w lewych kropkach kwantowych. Aby zapewnić odpowiednią lokalizację elektronów w stanie początkowym przyjęto głębokość studni potencjału lewych kropek kwantowych większą od prawych o 3.2 meV. Większa głębokość potencjału uwięzienia lewych kropek kwantowych zapewnia, że w przypadku braku pola elektrycznego lub dla słabego pola elektrycznego układ dwóch elektronów w stanie podstawowym jest zlokalizowany w kropkach kwantowych l_1 i l_2 (po jednym elektronie w każdej kropce). Prace eksperymentalne [6, 14, 62, 63, 64] pokazują, że możliwa jest preparacja stanu początkowego układu, zgodnie z zadanymi warunkami początkowymi.

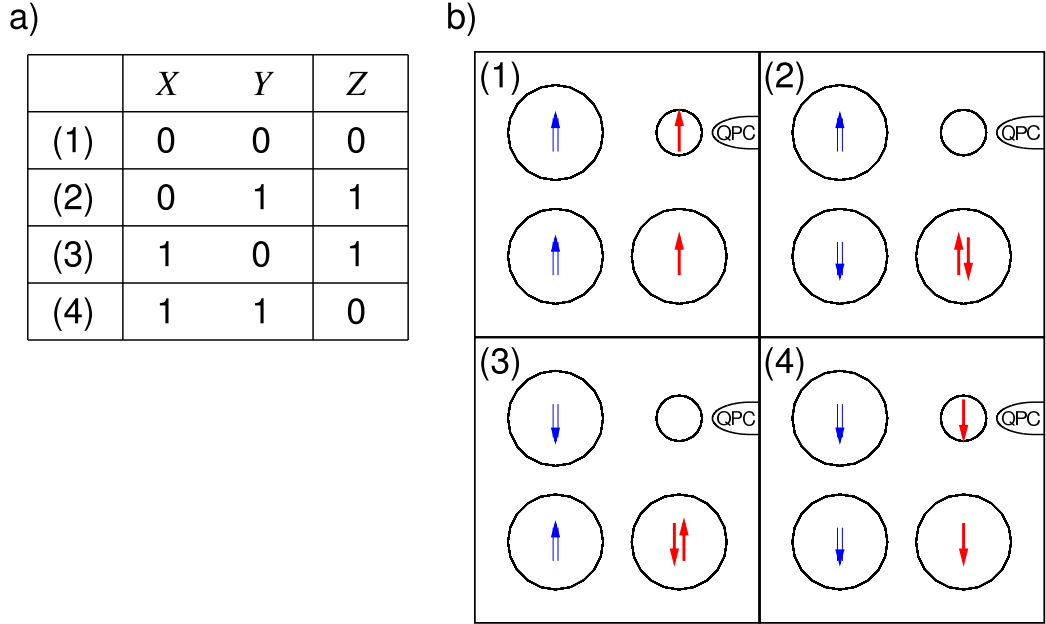
Rysunek 6.2 pokazuje dwa sposoby kontroli ewolucji układu kwantowego [65]: a) za pomocą zmiany głębokości studni potencjału kropek kwantowych l_1 i l_2 lub b) za pomocą zmiany zewnętrznego pola elektrycznego. Podnosząc dno studni potencjału kropek l_1 i l_2 (model A) lub przykładając odpowiednie pole elektryczne F (model B), dokonuje się kontrolowanej ewolucji układu kwantowego, podczas której elektrony tunelują z kropek lewych do prawych. Ewolucja układu kwantowego przebiega w sposób podobny do ewolucji układu spinów zbadanego eksperymentalnie w pracy [6]. Podczas ewolucji układu kwantowego może zachodzić także proces relaksacji, w trakcie którego elektrony osiągają stan o minimalnej energii całkowitej bez zmiany spinu. Taki proces relaksacji mógłby zachodzić w wyniku długozasięgowego oddzia-



Rysunek 6.2: Dwa sposoby kontroli ewolucji układu kwantowego za pomocą a) zmiany głębokości studni potencjału kropek kwantowych $l1$ i $l2$ (model A) oraz b) zewnętrznego pola elektrycznego (model B). Linie przerywane pokazują dwa przekroje potencjału uwięzienia w stanie początkowym (i), a linie ciągłe dwa przekroje w stanie końcowym (f) dla $y = 64$ nm i $y = -64$ nm.

ływania elektronów z dwuwymiarowym gazem elektronowym [60, 61]. Stan końcowy układu będzie stanem singletowym lub trypletowym o minimalnej energii całkowitej układu dwóch elektronów w potencjale (6.1). Elektrony, w zależności od ich spinu, lokalizują się w jednej lub w dwóch prawych kropkach kwantowych.

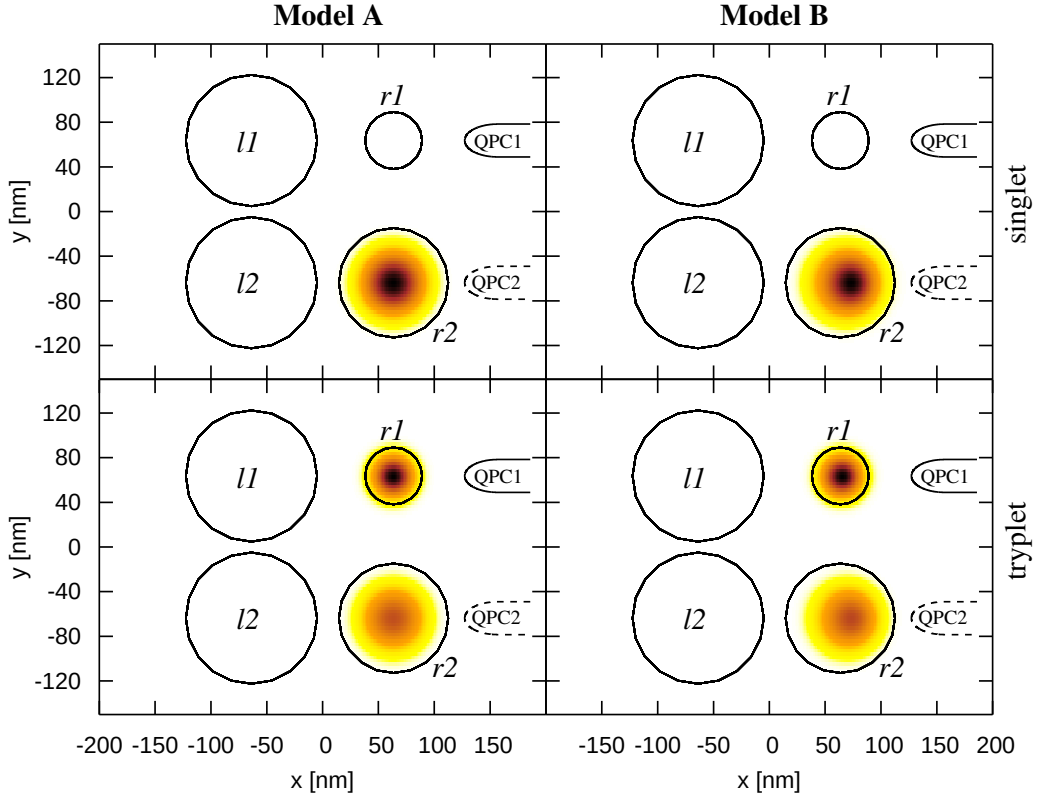
Jako wynik Z operacji logicznej XOR na spinach elektronów można przyjąć wynik pomiaru ładunku elektrycznego q w kropce kwantowej $r1$. Jeżeli w wyniku pomiaru zmierzony zostanie ładunek $q = -e$, to wynikiem operacji logicznej XOR jest $Z = 0$, natomiast brak ładunku w kropce $r1$, czyli $q = 0$ oznacza stan logiczny 1 . Do pomiaru ładunku elektrycznego zgromadzonego w kropce $r1$ można użyć bardzo czułych detektorów ładunku, np. kwantowego kontaktu punktowego (QPC) [3, 66, 67, 68] lub tranzystora jednoelektronowego [69, 70]. W przypadku odpowiedniego doboru parametrów kropek kwantowych, w kropce $r1$ zmierzony zostanie ładunek elektryczny $q = -e$ tylko w przypadku jednakowych spinów elektronów w stanie począt-



Rysunek 6.3: a) Tablica prawdy bramki logicznej XOR i b) schematyczny rysunek pokazujący lokalizację elektronów w układzie sprzężonych kropek kwantowych, który realizuje operację logiczną XOR. Niebieskie podwójne strzałki pokazują schematycznie stan wejściowy układu, czerwone - stan końcowy. QPC oznacza elektrodę kwantowego kontaktu punkтового.

kowym. Jeżeli dokona się odwrotnego przyporządkowania wyników pomiaru ładunku elektrycznego q , czyli zdefiniuje się $Z = 1$ dla zmierzonego ładunku $q = -e$ i $Z = 0$ w przypadku wyniku pomiaru $q = 0$, to proponowany nanoukład będzie działał jak bramka XNOR.

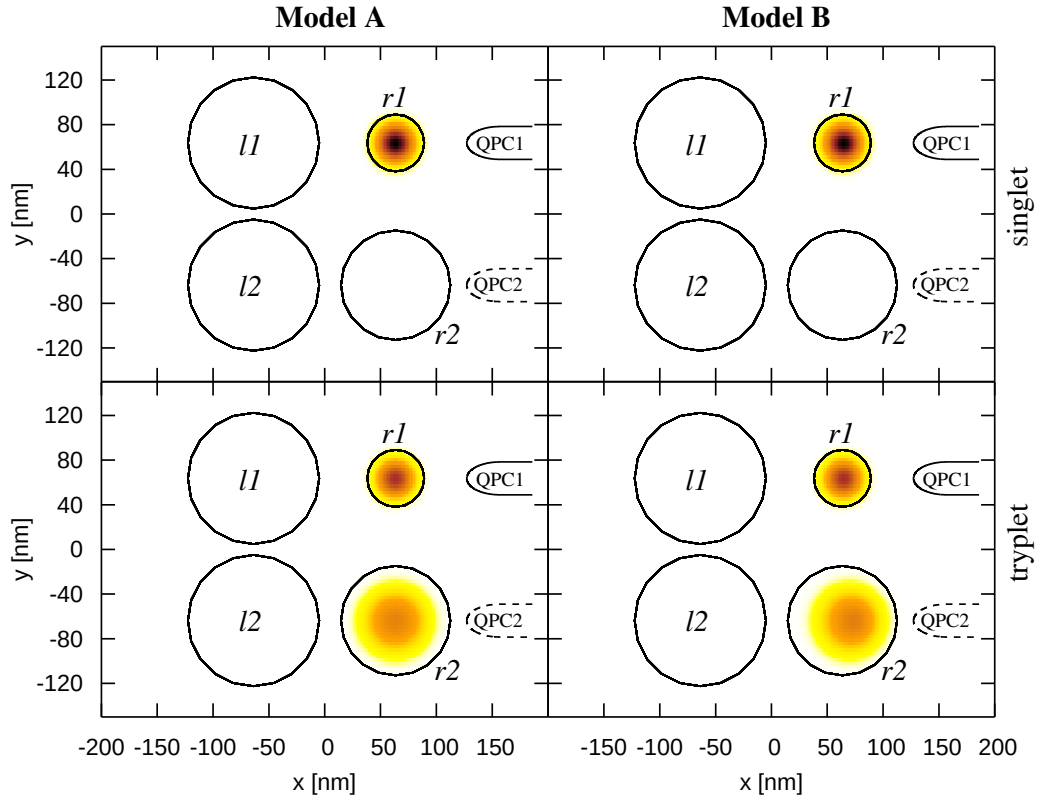
Rysunek 6.3 przedstawia tablicę prawdy bramki logicznej XOR i schematyczny rysunek lokalizacji elektronów o różnych spinach w układzie sprzężonych kropek kwantowych, który realizuje tę operację logiczną. Ze względu na nierozróżnialność elektronów, znając jedynie wynik pomiaru ładunku w stanie końcowym układu, nie można jednoznacznie stwierdzić, jaki był wejściowy stan spinowy układu. Z tego powodu operacje (1) i (4) oraz (2) i (3) są nierozróżnialne (por. rys. 6.3). Jeżeli jednak oprócz ładunkowego stanu końcowego układu znana jest dodatkowo składowa z -owa spinu jednego z elektronów, to można rozróżnić operacje (1) i (4). Nadal nie można rozróżnić operacji (2) i (3). W celu ich rozróżnienia potrzebna jest znajomość pełnego początkowego stanu spinowego układu dwóch elektronów.



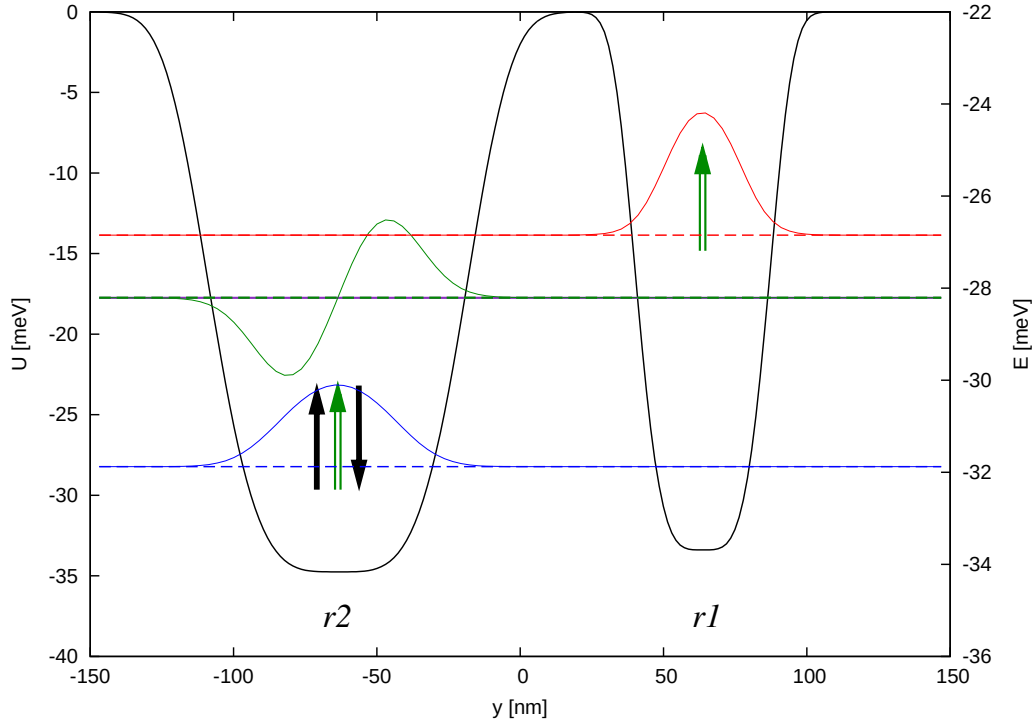
Rysunek 6.4: Gęstości jednoelektronowe w stanie końcowym układu dla operacji (2) i (3) - górny wiersz oraz (1) i (4) - dolny wiersz. Lewa kolumna pokazuje wyniki dla nanourządzenia opisanego modelem A, prawa kolumna - modelem B. $U_{0r1} = 33.4$ meV, $U_{0r2} = 34.8$ meV.

Rysunek 6.4 przedstawia schemat nanourządzenia i gęstości elektronowe obliczone dla stanu końcowego dla modelu A (lewa kolumna) i modelu B (prawa kolumna). W górnym wierszu przedstawione zostały gęstości jednoelektronowe dla operacji (2) i (3), natomiast w dolnym wierszu dla operacji (1) i (4). W przypadku antyrównoległych spinów (górny wiersz), obydwa elektrony zlokalizowane są w stanie końcowym w kropce $r2$ tworząc stan singletowy. Pomiar ładunku elektrycznego zgromadzonego w kropce $r1$ daje wynik $q(r1) = 0$, czyli stan logiczny **1**. W przypadku takich samych spinów elektronów (stan trypletowy, dolny wiersz), każdy z elektronów zlokalizowany zostanie w stanie końcowym w innej kropce kwantowej ($r1$ lub $r2$). Pomiar ładunku elektrycznego zgromadzonego w kropce $r1$ da zatem wynik $q(r1) = -e$, czyli stan logiczny **0**. QPC1 i QPC2 pokazują możli-

we położenia detektora ładunku. Linia ciągłą zaznaczone zostało położenie kwantowego kontaktu punkowego QPC1. Linia przerywaną zaznaczono alternatywne położenie detektora ładunku elektrycznego (QPC2). Umieszczenie detektora ładunku w pozycji QPC1 lub QPC2 nie wpływa na wynik operacji logicznej, zmienia się jedynie wartość zmierzonego ładunku elektrycznego. W przypadku detektora w położeniu QPC1 w wyniku pomiaru otrzymamy: $q(r1) = 0$ lub $q(r1) = -e$, natomiast pomiar detektorem w położeniu QPC2 da wynik: $q(r2) = -2e$ lub $q(r2) = -e$. Należy zwrócić uwagę na niewielkie różnice w gęstościach jednoelektronowych dla modelu A (lewa kolumna) i modelu B (prawa kolumna). W modelu A gęstości elektronowe są symetryczne względem środków kropek kwantowych, natomiast w przypadku układu w zewnętrznym polu elektrycznym gęstości elektronowe są przesunię-



Rysunek 6.5: Gęstości jednoelektronowe w stanie końcowym układu dla operacji (2) i (3) - górny wiersz oraz (1) i (4) - dolny wiersz. Lewa kolumna pokazuje wyniki dla nanourządzenia opisanego modelem A, prawa kolumna - modelem B. $U_{0r1} = 52.2$ meV, $U_{0r2} = 34.8$ meV.



Rysunek 6.6: Potencjał uwięzienia (linia czarna), cztery pierwsze jednoelektronowe poziomy energetyczne (linie przerywane) oraz odpowiadające im funkcje jednoelektronowe (linie ciągłe). Strzałkami pokazano schematycznie obsadzenie stanów jednoelektronowych dla singletu (czarne strzałki) i trypletu (podwójne zielone strzałki).

te w kierunku prawych ścian kropek kwantowych, co wynika z działania pola elektrycznego F .

Rysunek 6.5 przedstawia schemat nanourządzenia i gęstości elektronowe w stanie końcowym dla modelu A (lewa kolumna) i modelu B (prawa kolumna) dla innego zakresu parametrów kropki kwantowej $r1$, w którym nanoukład również powinien realizować operację XOR. Widać, że w stanie singletowym oba elektrony zlokalizowane są w kropce $r1$, natomiast w stanie trypletowym każdy z elektronów zlokalizowany jest w innej kropce kwantowej. W tym przypadku pomiar ładunku za pomocą detektora QPC1 da wynik: $q(r1) = -2e$ lub $q(r1) = -e$, natomiast pomiar ładunku detektorem QPC2 da wynik: $q(r2) = 0$ lub $q(r2) = -e$.

W celu lepszego zrozumienia zachodzących w układzie sprzężonych kropek kwantowych zmian lokalizacji elektronów na rysunku 6.6 przedstawio-

na została energia potencjalna elektronu i jednoelektronowe funkcje falowe w funkcji współrzędnej y wzdłuż prostej przechodzącej przez środki prawych kropek kwantowych. Pokazano także cztery pierwsze jednoelektronowe poziomy energetyczne (linie przerywane) oraz odpowiadające im funkcje falowe. Strzałkami zaznaczono w sposób symboliczny obsadzenie w stanie końcowym stanów jednoelektronowych dominujących w odpowiednich konfiguracjach dwuelektronowych: singlet (czarne strzałki) i tryplet (podwójne zielone strzałki). Można zauważyć, że wśród konfiguracji dla stanu singletowego dominuje podwójnie obsadzony stan podstawowy. Ze względu na zakaz Pauliego, w stanie trypletowym elektrony elektrony obsadzają różne jednoelektronowe stany przestrzenne.

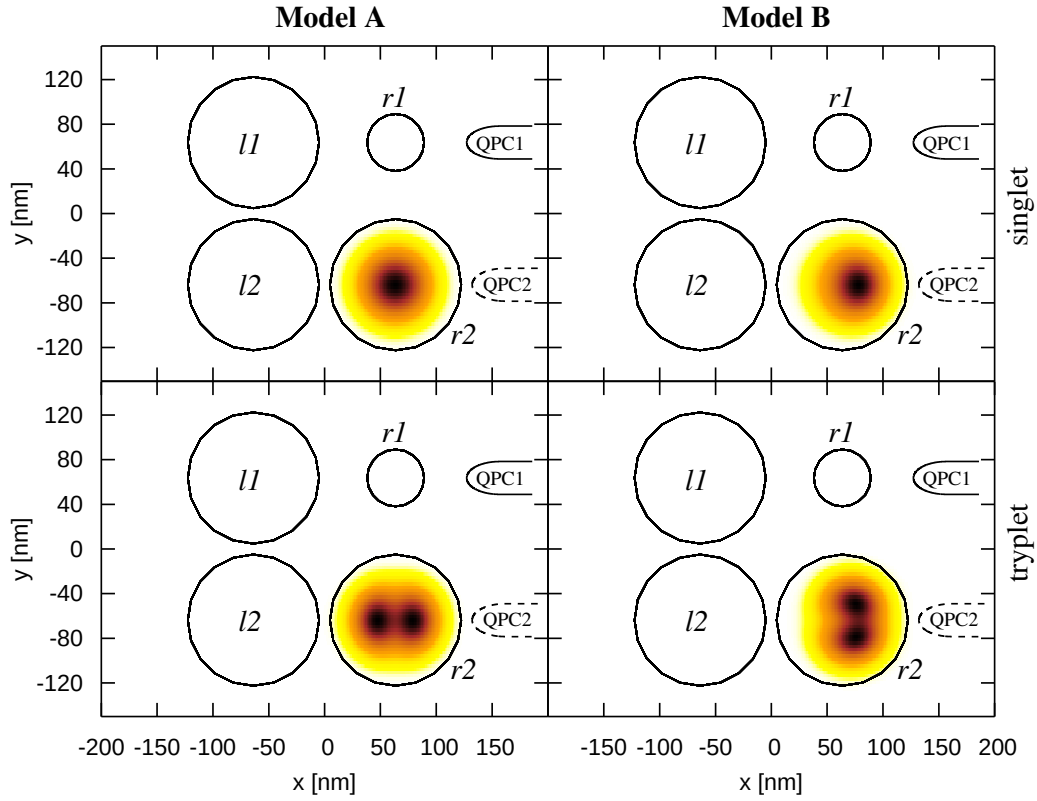
Dla odpowiednio dobranych parametrów nanoukładu otrzymujemy różną lokalizację przestrzenną dla singletu i trypletu, co jest wymagane do prawidłowego działania rozważanego nanoukładu jako bramki XOR. O lokalizacji elektronów w tej samej lub różnych kropkach kwantowych decyduje minimum całkowitej energii układu czterech kropek kwantowych zawierających dwa elektrony.

6.4 Optymalizacja parametrów nanoukładu

Aby proponowany układ działał jako bramka XOR, parametry kropek kwantowych muszą być dobrane w taki sposób, aby zapewnić różną lokalizację przestrzenną elektronów w stanie singletowym i trypletowym. Przy ustalonych parametrach kropek $l1$ i $l2$ dobór odpowiednich parametrów kropek kwantowych $r1$ i $r2$ jest kluczowy dla działania rozpatrywanego układu jako bramki logicznej XOR. Rysunki 6.7 i 6.8 pokazują rozkłady elektronów w stanie końcowym w przypadku niewłaściwego doboru parametrów. Niewłaściwy dobór parametrów kropek kwantowych $r1$ i $r2$ powoduje, że rozpatrywany układ nie działa jak bramka logiczna XOR.

Rysunek 6.7 pokazuje rozkład elektronów oraz schemat nanoukładu, w którym kropka kwantowa $r2$ posiada za duże rozmiary. W tym przypadku zarówno dla stanu singletowego jak i trypletowego otrzymuje się podwójne obsadzenie kropki $r2$.

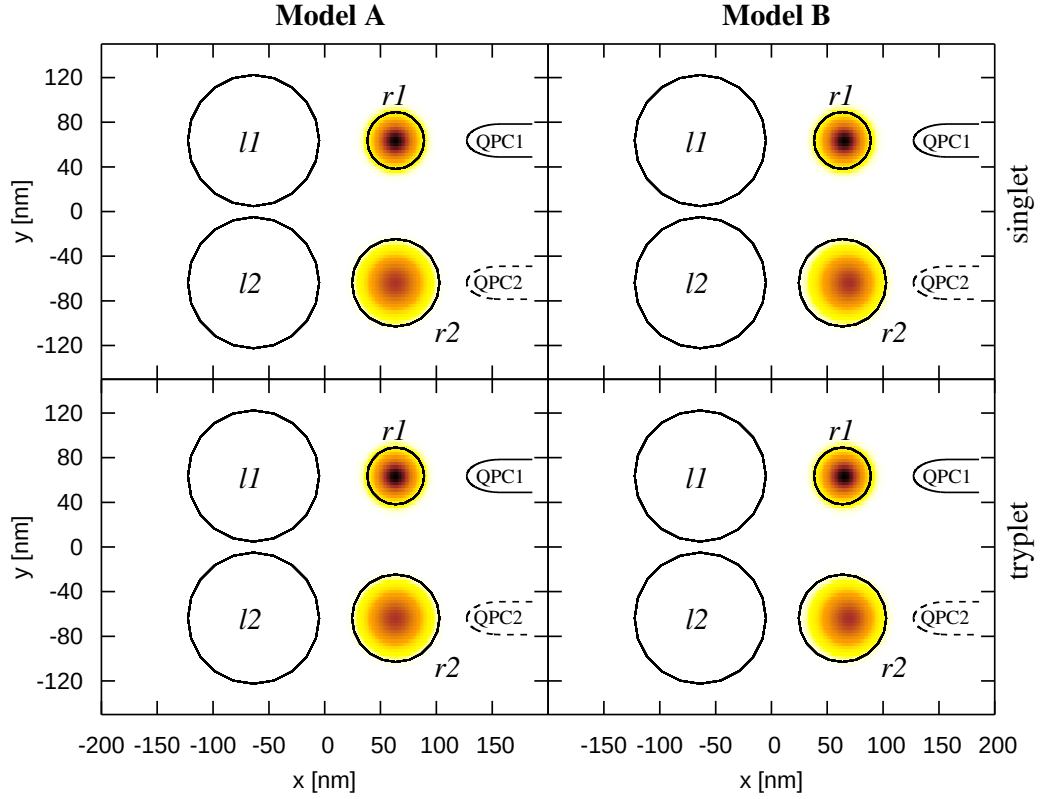
Rysunek 6.8 pokazuje rozkład elektronów oraz schemat nanoukładu w przypadku, gdy kropka kwantowa $r2$ posiada za małe rozmiary przestrzenne. W tym przypadku, ze względu na elektrostatyczne oddziaływanie pomiędzy elektronami, korzystniejsza energetycznie jest sytuacja, w której elektrony



Rysunek 6.7: Rozkład elektronów w przypadku, gdy kropka kwantowa $r2$ jest za duża. Parametry kropek: $R_{r1} = 25.5$ nm, $R_{r2} = 58.7$ nm.

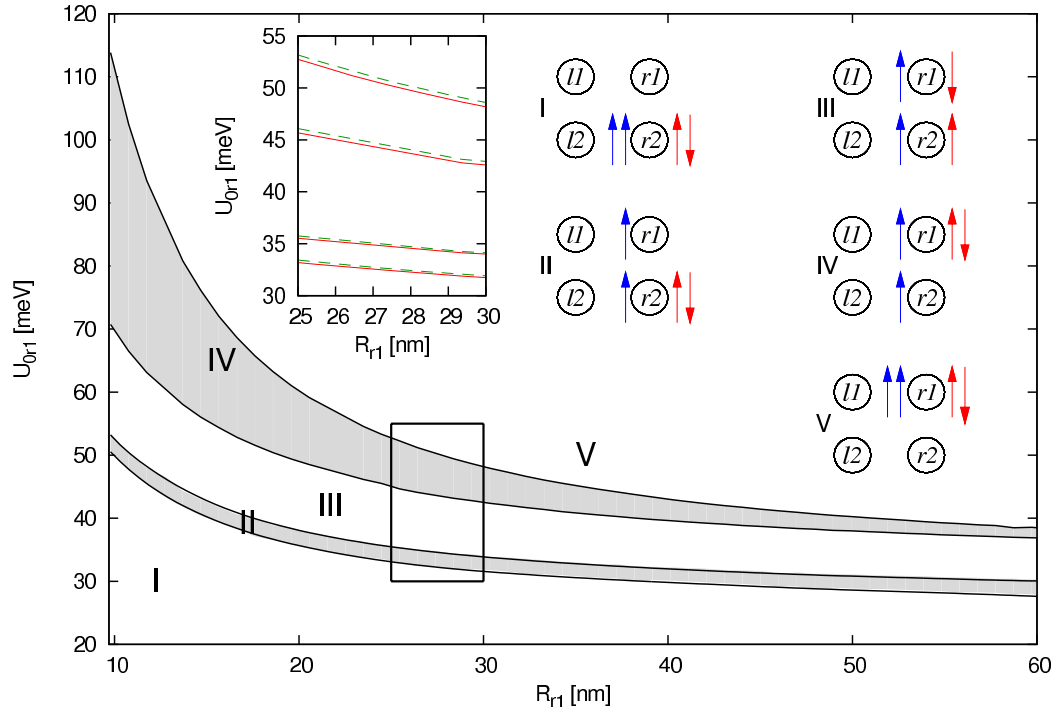
w stanie końcowym zlokalizowane są zawsze w różnych kropkach kwantowych.

Ze względu na różną lokalizację elektronów w różnych spinowych stanach końcowych, można wyróżnić pięć obszarów (I-V) parametrów kropki kwantowej $r1$ przy ustalonych parametrach kropek $l1$, $l2$ i $r2$. Rysunek 6.9 pokazuje granice tych obszarów oszacowane w wyniku serii obliczeń oraz w sposób schematyczny lokalizację elektronów w kropkach kwantowych $r1$ i $r2$ w przypadku spinów równoległych (strzałki niebieskie) i antyrównoległych (strzałki czerwone) dla stanu końcowego. W obszarze I oba elektrony, niezależnie od stanu spinowego, zlokalizowane są w kropce kwantowej $r2$. W obszarze II w przypadku spinów antyrównoległych oba elektrony zlokalizowane są w kropce $r2$, natomiast w przypadku spinów równoległych, ze względu na minimum energii całkowitej układu dwuelektronowego, elektrony lokalizują się w dwóch kropkach kwantowych $r1$ i $r2$. W obszarze tym, ze względu na możliwość



Rysunek 6.8: Rozkład elektronów w przypadku, gdy kropka kwantowa $r2$ posiada za małe rozmiary przestrzenne. Parametry kropek: $R_{r1} = 25.5$ nm, $R_{r2} = 39.2$ nm.

rozdzielenia pomiędzy różnymi stanami spinowymi, rozważany układ może działać jak bramka logiczna XOR. W obszarze III w każdym końcowym stanie spinowym elektrony zlokalizowane są w różnych kropkach kwantowych. W obszarze IV, podobnie jak w obszarze II, lokalizacja elektronów w kropkach kwantowych zależy od spinu elektronów, zatem rozważany układ może działać jak bramka logiczna XOR. W przypadku spinów antyrównoległych oba elektrony zlokalizowane są w kropce kwantowej $r1$, natomiast w przypadku spinów równoległych otrzymuje się pojedyncze obsadzenie kropek $r1$ i $r2$. W obszarze V, ze względu na zbyt dużą głębokość potencjału uwięzienia kropki $r1$, otrzymuje się podwójne obsadzenie tej kropki niezależnie od spinu elektronów. Rysunek 6.9 pokazuje jak ważny jest właściwy dobór parametrów kropek kwantowych w celu działania proponowanego nanoukładu jako bramki logicznej XOR. Wstawka do rysunku 6.9 pokazuje przesunięcie



Rysunek 6.9: Granice obszarów parametrów kropki kwantowej $r1$ odpowiadających różnej lokalizacji elektronów przy ustalonych parametrach pozostałych kropek. Zacięniowane zostały obszary, w których nanoukład może pracować jak bramka logiczna XOR. Schematycznie pokazano lokalizację elektronów w stanie końcowym dla poszczególnych obszarów parametrów kropki $r1$, dla spinów równoległych - strzałki niebieskie i antyrównoległych - strzałki czerwone. Wstawka pokazuje granice obszarów I-V dla modelu A (linie czerwone) i modelu B (linie zielone).

granic poszczególnych obszarów działania bramki XOR dla dwóch różnych sposobów kontroli ewolucji układu kwantowego (modele A i B) w obszarze parametrów zaznaczonym kwadratem na rysunku głównym. Linie czerwone (ciągłe) pokazują granice obszarów w przypadku zmiany głębokości studni potencjału kropek lewych $l1$ i $l2$ (model A), natomiast linie zielone (przerywane) dla układu kontrolowanego zewnętrznym polem elektrycznym (model B). Widać, że w przypadku modelu B, granice obszarów działania nanoukładu jako bramki XOR przesunięte są nieznacznie w górę względem odpowiednich granic obszarów w modelu A. Jest to spowodowane tym, że zewnętrzne pole elektryczne modyfikuje kształt studni potencjału (zmniejsza efektywną pojemność kwantową układu kropek kwantowych [por. rys. 6.2]) i w rezultacie

- do działania bramki XOR - potrzebna jest nieco większa głębokość kropki kwantowej $r1$. Należy podkreślić, że różnice pomiędzy granicami obszarów II i IV dla nanoukładów A i B są niewielkie.

6.5 Podsumowanie

W rozdziale tym przedstawiona została propozycja realizacji bramki logicznej XOR na spinach elektronów w oparciu o układ czterech sprzężonych bocznie kropek kwantowych [56]. Pokazano, że dla odpowiedniego doboru parametrów kropek kwantowych proponowany nanoukład może wykonywać operację logiczną XOR. Należy podkreślić, że zaproponowana realizacja bramki logicznej XOR nie jest realizacją kwantowej bramki dwukubitowej, czyli nie zachodzi

$$|X\rangle |Y\rangle \Rightarrow |X\rangle |Z = X \oplus Y\rangle, \quad (6.2)$$

gdzie $\oplus$ oznacza operację modulo 2. Jeżeli natomiast stany wejściowe $|X\rangle$, $|Y\rangle$ i stan wyjściowy $|Z\rangle$ zdefiniujemy tak jak na stronach 59-63, to zachodzi

$$|X\rangle |Y\rangle \Rightarrow |Z = X \oplus Y\rangle, \quad (6.3)$$

zgodnie z tabelą prawdy na rysunku 6.3.

Zaletą proponowanego układu jest w pełni elektryczny sposób kontroli ewolucji stanu układu kwantowego. Kontrolowana ewolucja może być realizowana za pomocą zmiany głębokości studni potencjału kropek kwantowych $l1$ i $l2$ (model A) lub za pomocą pola elektrycznego wytworzonego przez dodatkowe elektrody e_l i e_r (model B). Dodatkowym atutem proponowanego nanoukładu jest prosty pomiar stanu końcowego układu: odbywa się on poprzez pomiar ładunku elektrycznego zgromadzonego w kropce kwantowej $r1$ lub $r2$, który może być dokonywany z bardzo dużą dokładnością, np. za pomocą kwantowego kontaktu punkтового. W wyniku pomiaru ładunku zgromadzonego w kropce kwantowej $r1$ lub $r2$ możemy jednoznacznie określić końcowy stan spinowy układu dwóch elektronów. A zatem w nanoukładzie dokonana zostaje konwersja spinu elektronu do ładunku [1, 67, 68, 71]. Z tego powodu proponowany nanoukład można także traktować jak ładunkowy detektor spinu.

Rozdział 7

Dyskusja

Wyniki przedstawione w rozdziałach 2-6 pokazują wpływ potencjału uwięzienia i zewnętrznego pola elektrostatycznego na własności układów jedno- i dwuelektronowych uwięzionych w sprzężonych kropkach kwantowych. Nanoukłady takie są najczęściej wytwarzane w heterostrukturze półprzewodnikowej za pomocą odpowiednio uformowanego pola elektrycznego, którego źródłem są elektrody bramek. Wytworzone w taki sposób kropki kwantowe noszą nazwę elektrostatycznych kropek kwantowych lub kropek kwantowych zdefiniowanych elektrostatycznie [37]. W elektrostatycznych kropkach kwantowych dominujący wpływ na stany elektronowe ma zewnętrzne pole elektrostatyczne, które prowadzi do profilu potencjału uwięzienia, który może być modyfikowany w zaplanowany sposób [37]. Efekty pochodzące od modyfikacji potencjału uwięzienia były przedmiotem badań wykonanych w ramach niniejszej rozprawy.

W obliczeniach zaniedbane zostały inne oddziaływania, które również zmieniają własności stanów elektronowych, ale na ogół w znacznie mniejszym stopniu. W tym rozdziale krótko zostaną przedyskutowane następujące oddziaływania: sprzężenie elektron-fonon, sprzężenie spin-orbita oraz sprzężenie spinów elektronów i jąder atomowych. W badaniach oddziaływania wymiennego interesujący jest wpływ zaniedbanych oddziaływań na lokalizację elektronów, natomiast z punktu widzenia obliczeń kwantowych interesujący jest problem dekoherencji elektronowych stanów kwantowych [72].

Wykorzystanie spinu elektronu w spintronice i do obliczeń kwantowych wymaga jak najdłuższego czasu koherencji elektronowych stanów spinowych. Oddziaływanie elektronów z otoczeniem prowadzi do dwóch niekorzystnych procesów: rozpadu i dekoherencji stanu kwantowego. W wyniku tych proce-

sów informacja przechowywana w kubicie jest tracona. Rozpad stanu kwantowego można opisać za pomocą czasu życia stanu kwantowego (stosując analogię ze zjawiskiem rezonansu magnetycznego nazywamy ten czas czasem relaksacji podłużnej T_1), natomiast dekoherencja scharakteryzowana jest przy użyciu czasu dekoherencji (czasu relaksacji poprzecznej T_2) [73]. Zwykle zachodzi nierówność $T_2 < T_1$. Możliwość zastosowania kubitów spinowych w obliczeniach kwantowych jest zatem ograniczona czasem dekoherencji. Zgodnie z tzw. kryterium diVinzenzo [74] warunkiem koniecznym zapisu, przetwarzania informacji kwantowej oraz wykonania korekcji błędów jest, aby czas dekoherencji był $\sim 10^4$ razy dłuższy od czasu operacji kwantowej. Dekoherencja kubitów spinowych wynika głównie z oddziaływania spinu elektronu ze spinami jąder atomowych (oddziaływania nadsubtelnego).

W rozdziale tym zostanie przedyskutowane oddziaływanie elektron-fonon, oddziaływanie spin-orbita [73, 75, 76, 77] i oddziaływanie spinu elektronu ze spinami jąder [78, 79, 80, 81, 82]. Oszacowanie wielkości tych oddziaływań w skali energii zostało przedstawione w pracach [83, 84, 85]

7.1 Oddziaływanie z fononami

W polarnych związkach półprzewodnikowych dominującym sprzężeniem elektron-fonon jest sprzężenie Fröhlicha z fononami optycznymi LO. Oddziaływanie elektronu z polem fononów LO modyfikuje jego właściwości prowadząc do powstania polaronu [86]. Dla odpowiednio silnego sprzężenia elektron-fonon układ dwóch elektronów może wytworzyć stan związany, zwany bipolaronem [87]. Lokalizacja elektronów w sprzężonych kropkach kwantowych może prowadzić do powstawania bipolaronów przy znacznie słabszym niż w kryształach litym [87, 88] sprzężeniu z fononami. Powstawanie polaronów i bipolaronów powinno prowadzić do silniejszej lokalizacji elektronów w kropkach kwantowych, co z kolei powinno zwiększać oddziaływanie wymienne. Z drugiej strony sprzężenie z fononami jest źródłem dekoherencji elektronowych stanów orbitalnych [89].

W kryształach litym dwa polarony mogą zlokalizować się na dodatnio naładowanej domieszce donorowej D^+ tworząc centrum D^- [90]. Układ taki jest analogiem pojedynczej kropki kwantowej zawierającej dwa elektrony [91]. W artykule [91] pokazano, że sprzężenie z fononami LO znacznie modyfikuje ekranowanie oddziaływania elektron-elektron, co prowadzi do zwiększenia

energii wiązania układu dwóch elektronów w kropce kwantowej [91]. W rezultacie otrzymujemy silniejszą lokalizację elektronów w pojedynczej kropce kwantowej, a zatem spodziewamy się wzrostu energii wymiany.

7.2 Oddziaływanie spin-orbita

Oddziaływanie spin-orbita może być wykorzystane do kontrolowanej ewolucji kubitów spinowych i w rezultacie do wykonania dowolnej operacji jednokubitowej [92, 93]. Z drugiej strony oddziaływanie to jest jedną z przyczyn relaksacji i dekoherencji stanu spinowego [72]. Dla elektronu w układzie dwuwymiarowym sprzężenie spin-orbita może być przedstawione za pomocą hamiltonianu [75, 94]

$$H_{SO} = \alpha(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x) + \beta(p_y\sigma_y - p_x\sigma_x) , \quad (7.1)$$

gdzie σ_x, σ_y są macierzami Pauliego, $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ jest operatorem pędu elektronu, a α i β są parametrami sprzężenia. Pierwszy wyraz we wzorze (7.1) (tzw. sprzężenie Rashby) związany jest z asymetrią potencjału uwięzienia i może być do pewnego stopnia zmieniany poprzez przyłożenie odpowiednich napięć do bramek. Drugi wyraz we wzorze (7.1) (tzw. sprzężenie Dresselhausa [95]) związany jest z brakiem środka inwersji sieci krystalicznej.

Bonesteel *et al.* pokazali, że efekt oddziaływania spin-orbita może być skutecznie zminimalizowany [96, 97]. Ponadto, w przypadku odpowiednio przeprowadzonej ewolucji układu, wpływ oddziaływania spin-orbita może być całkowicie wyeliminowany [98]. Pomiar czasu koherencji w sprzężonych bocznie kropkach kwantowych [6, 14] daje wynik $T_2 \sim 10$ ns. Golovach *et al.* [99] pokazali, że w słabych polach magnetycznych, oddziaływanie spin-orbita jest słabym źródłem dekoherencji układów kwantowych. Wyniki pomiarów wykonanych w drucie kwantowym InAs [100] pokazują, że oddziaływanie spin-orbita modyfikuje stany elektronowe w silnych polach magnetycznych, natomiast przy braku pola magnetycznego nie zmienia stanów elektronowych.

7.3 Oddziaływanie ze spinami jąder

Wszystkie materiały półprzewodnikowe grup III-V posiadają naturalnie występujące izotopy o niezerowym spinie jądrowym [81]. Elektron o spinie s ,

uwięziony w kropce kwantowej, oddziałuje ze spinami jąder atomów kropki poprzez oddziaływanie nadsubtelne, które można opisać za pomocą hamiltonianu [78, 81]

$$H_{hf} = \mathbf{s} \cdot \sum_i A_i \mathbf{I}_i , \quad (7.2)$$

gdzie $\mathbf{I}_i$ jest operatorem spinu jądra, a A_i jest stałą sprzężenia nadsubtelnego. Oddziaływanie to jest bardzo słabe, jednak ze względu na znaczną liczbę jąder atomowych w obszarze kropki kwantowej może prowadzić do modyfikacji elektronowych stanów spinowych. W wyniku oddziaływania spinu elektronu uwięzionego w kropce kwantowej ze spinami jąder atomowych może następować zarówno rozpad jak i dekoherencja elektronowych kubitów spinowych [101]. W pracach [79, 101, 102] oszacowano czas dekoherencji, wynikający z oddziaływania nadsubtelnego, otrzymując $T_2 \sim 5$ ns . Jednym ze sposobów zmniejszenia wpływu spinu jąder na czas dekoherencji jest polaryzacja spinów jąder, co zmniejsza prawdopodobieństwo relaksacji podłużnej [102]. Inną metodą wyeliminowania oddziaływania wpływu spinu jąder jest wytwarzanie sprzężonych kropek kwantowych w heterostrukturach wytworzonej z krzemu i germanu [103, 104], dla których występują naturalne izotopy o zerowym spinie jądrowym. Pomiar czasu koherencji T_2 w takich układach daje wyniki $T_2 = 62$ ms [105].

Rozdział 8

Podsumowanie

W rozprawie tej przedstawiono wyniki badań wpływu kształtu potencjału uwięzienia i zewnętrznego pola elektrycznego na energię oddziaływania wymiennego w nanourządzeniach zawierających dwie sprzężone kropki kwantowe. Zbadane zostały układy sprzężonych bocznie elektrostatycznych kropek kwantowych [3, 4] oraz układy kropek kwantowych wytworzonych w drutach kwantowych [15]. Otrzymane wyniki posłużyły do zaproponowania modelu bramki logicznej XOR w układzie czterech sprzężonych kropek kwantowych.

W rozdziale 3 zbadany został wpływ kształtu potencjału uwięzienia na oddziaływanie wymienne pomiędzy elektronami w sprzężonych bocznie kropkach kwantowych. Pokazano, że zależność energii wymiany od odległości d pomiędzy centrami potencjału uwięzienia jest różna dla potencjałów miękkich (opisanych parametrem $p = 2$) i twardych ($p \geq 4$). W przypadku potencjałów twardych energia wymiany J wzrasta wraz ze zwiększającą się odległością d . Dla pewnej odległości $d = d^{max}$ osiąga wartość maksymalną, a następnie gwałtownie spada do zera, co wynika z degeneracji singlet-tryplet dla dużych odległości d . Maksimum energii wymiany związane jest z silną lokalizacją elektronów w wąskim obszarze wewnętrznej studni potencjału, która powstaje dla odpowiednio małego d . Parametry układu, dla którego otrzymano maksymalną wartość energii wymiany, odpowiadają układowi znanemu w literaturze pod nazwą „core-shell quantum dot” [54]. Jest to układ złożony z kropek kwantowych wewnętrznej i zewnętrznej [54].

W rozdziale 4 przedstawione zostały wyniki badań wpływu zewnętrznego pola elektrycznego na energię wymiany w nanoukładach zbudowanych z kołowych i/lub eliptycznych kropek kwantowych o różnej geometrii i parametrach potencjału uwięzienia. Znalezione układy, dla których energia wymia-

ny prawie nie zależy od pola w szerokim zakresie zmian pola elektrycznego. Pokazano, że dla kropek kwantowych o słabym sprzężeniu tunelowym pomiędzy kropkami energia wymiany w słabych i pośrednich polach elektrycznych jest liniową funkcją pola. Ponadto znaleziono, że parametr α określający nachylenie krzywej $J(F) = \alpha F + \beta$, przyjmuje stałą wartość dla wszystkich zbadanych układów, niezależnie od ich geometrii i parametrów potencjału uwięzienia. Zbadano dokładnie tę właściwość i pokazano, że odpowiednio silne sprzężenie tunelowe pomiędzy kropkami kwantowymi niszczy liniową zależność $J(F)$.

W rozdziale 5 zbadany został wpływ pola elektrycznego na energię wymiany w sprzężonych kropkach kwantowych wytworzonych w drucie kwantowym o różnym przekroju poprzecznym: kołowym, kwadratowym i sześciokątnym. Są to pierwsze wyniki dla energii wymiany w nanoukładach trójwymiarowych o różnym przekroju poprzecznym drutu kwantowego. Pokazano, że zależność energii wymiany od parametrów potencjału uwięzienia jest jakościowo podobna do tej otrzymanej w rozdziałach 2 i 4 dla nanoukładów dwuwymiarowych.

Wyniki obliczeń przedstawione w rozdziałach 4 i 5 pokazują, że za pomocą pola elektrycznego można efektywnie sterować energią wymiany w sprzężonych kropkach kwantowych. Zwiększając lub zmniejszając napięcie przyłożone pomiędzy elektrodami źródła i drenu można włączyć lub wyłączyć oddziaływanie wymienne. Wartości pola elektrycznego, dla którego zachodzi to włączanie/wyłączanie zależą od parametrów potencjału uwięzienia. W elektrostatycznych kropkach kwantowych parametry te mogą być zmieniane w zaplanowany sposób za pomocą odpowiednich napięć przykładanych do elektrod bramek, które wytwarzają potencjał uwięzienia elektronów w kropkach kwantowych. Otrzymane w rozdziałach 4 i 5 wyniki mogą zostać wykorzystane do projektowania nanourządzeń półprzewodnikowych, w których operacje na stanach elektronowych kontrolowane są za pomocą pola elektrycznego.

W oparciu o wyniki rozdziału 4 przedstawiono propozycję realizacji bramki logicznej XOR na spinach w poczwórnej kropce kwantowej. Pokazano, że dla odpowiednio dobranych parametrów kropek kwantowych nanoukład zawierający cztery sprzężone kropki kwantowe może wykonywać operację logiczną XOR. Przedyskutowano dwie możliwe realizacje fizyczne nanoukładu wykonującego operację XOR. Zaletą proponowanych nanoukładów jest możliwość kontroli ewolucji układu kwantowego za pomocą zewnętrznych napięć przykładanych do elektrod źródła i drenu lub elektrod bramek. Odczyt stanu

końcowego układu odbywa się poprzez pomiar ładunku elektrycznego w jednej z kropek kwantowych i wykorzystuje zjawisko konwersji spinu do ładunku. Proponowana realizacja operacji logicznej XOR opiera się zatem na procesach sterowanych w sposób wyłącznie elektryczny.

Dodatek A

Metoda numeryczna

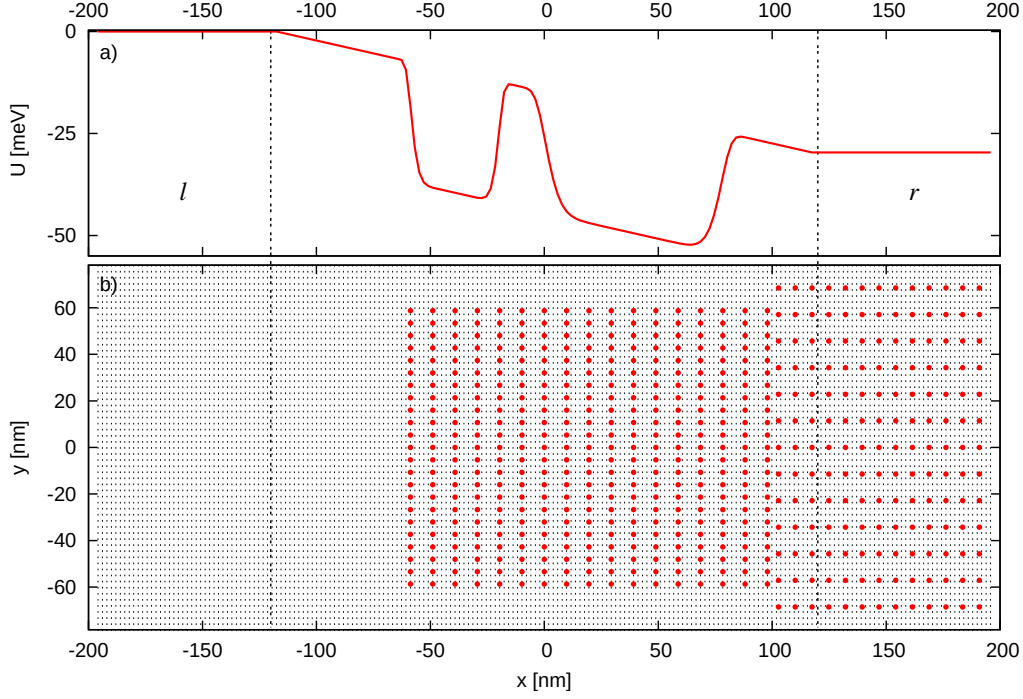
W tym rozdziale zostanie przedstawiona numeryczna metoda rozwiązywania niezależnego od czasu równania Schrödingera. Metoda ta została wcześniej wykorzystana do obliczenia stanów elektronowych w sprzężonych pierścieniach kwantowych [106] i sprzężonych kropkach kwantowych [49, 55]. Metoda ta może być stosowana do kilkuelektronowych układów dwu- i trójwymiarowych. Ze względu na prostotę prezentacji, w rozdziale tym zostanie zaprezentowany schemat obliczeń na przykładzie dwuwymiarowym.

Na początku określono rozmiar pudła obliczeniowego (por. rys. A.1). W większości obliczeń [49] przyjęto rozmiary: $L_x = 400$ nm w kierunku x i $L_y = 140$ nm w kierunku y . Następnie zdiagonalizowano macierz hamiltonianu (2.6) w bazie wielocentrowych funkcji Gaussa, czyli

$$g_{ij}(x, y) = \exp[-\gamma_1(x - x_i)^2 - \gamma_2(y - y_j)^2], \quad (\text{A.1})$$

gdzie γ_1 i γ_2 są parametrami wariacyjnymi.

Centra gaussowskie (x_i, y_j) , gdzie $i = 1, \dots, I$, a $j = 1, \dots, J$, tworzą siatkę punktów, która swoim zasięgiem obejmuje cały obszar sprzężonych bocznie kropek kwantowych (rozmiary tego obszaru są większe niż zasięg potencjału uwięzienia w wybranym kierunku (por. rys. A.1)). Centra funkcji Gaussa (A.1) znajdują się także w obszarze prawej elektrody, do której tunelują elektrony z układu sprzężonych kropek kwantowych, po przekroczeniu pewnego dostatecznie dużego pola elektrycznego. Jednoelektronową wariacyjną funkcję falową $\phi_\nu(x, y)$ dla stanu ν przyjmujemy w postaci kombinacji



Rysunek A.1: (a) Profil potencjału uwięzienia U w funkcji x dla $y = 0$ i $F = 1.26$ kV/cm. Pionowe przerywane linie pokazują granice lewej l i prawej r elektrody. (b) Schemat pudła obliczeniowego. Czerwone punkty oznaczają pozycje centrów gaussowskich, a czarne kropki pokazują węzły siatki przestrzennej używanej do dyskretnej reprezentacji funkcji falowej (A.3). Parametry układu: $R_{lx} = R_{ly} = 20$ nm, $R_{rx} = 40$ nm, $R_{ry} = 40$ nm, $p = 10$, i $d = 80$ nm.

liniowej funkcji Gaussa (A.1)

$$\phi_\nu(x, y) = N_\nu \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J c_{ij}^\nu g_{ij}(x, y), \quad (\text{A.2})$$

gdzie N_ν jest stałą normalizacji. Liczby I i J zależą od rozmiaru badanego układu, a ich maksymalne wartości użyte w obliczeniach wynosiły: $I_{max} = 50$ i $J_{max} = 33$. Prowadzi to do maksymalnej liczby 1650 funkcji Gaussa (A.1), co zapewnia wysoką dokładność otrzymanych rozwiązań jednoelektronowych. Elementy macierzowe jednoelektronowego hamiltonianu (2.6) są obliczane w bazie (A.1) w następujący sposób: elementy macierzowe energii kinetycznej są liczone analitycznie, natomiast elementy macierzowe energii potencjalnej

są wyznaczane za pomocą całkowania numerycznego. W wyniku rozwiązania uogólnionego problemu własnego dla hamiltonianu (2.6) w bazie (A.1) otrzymujemy parametry liniowe c'_{ij} i energie własne E_ν stanów jednoelektronowych $\nu = 1, \dots, N_\nu$. Wartości nieliniowych parametrów wariacyjnych γ_1 i γ_2 otrzymane są z minimalizacji wartości energii stanu podstawowego E_0 . Wartości parametrów γ_1 i γ_2 otrzymane z minimalizacji energii stanów wzbudzonych tylko w nieznacznym stopniu różnią się od wartości otrzymanych przy minimalizacji energii stanu podstawowego. Z tego powodu dla każdego stanu ν przyjęte zostały takie same wartości γ_1 i γ_2 jak dla stanu $\nu = 0$.

W następnym kroku wyznaczono siatkę przestrzenną (x_m, y_n) , gdzie $m = 1, \dots, M$ i $n = 1, \dots, N$ i znaleziono dyskretną reprezentację jednoelektronowych funkcji falowych, czyli

$$\phi_\nu^{mn} = \phi_\nu(x_m, y_n). \quad (\text{A.3})$$

Jest to macierz $M \times N$. Uzupełniając jednoelektronowe funkcje falowe $\phi_\nu(x, y)$ o funkcje własne χ_σ z-owej składowej spinu elektronu otrzymano spinorbitale $\phi_{\nu\sigma}(x, y)$. Ze spinorbitali $\phi_{\nu\sigma}(x, y)$ utworzono wyznaczniki Slatera

$$\Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_{\nu_1\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\nu_2\sigma_2}(\mathbf{r}_2) - \phi_{\nu_2\sigma_2}(\mathbf{r}_1) \phi_{\nu_1\sigma_1}(\mathbf{r}_2) \right], \quad (\text{A.4})$$

gdzie $n \equiv (\nu_1, \sigma_1, \nu_2, \sigma_2)$ numeruje różne konfiguracje dwuelektronowe. Wyznaczniki Slatera $\Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ wykorzystuje się do utworzenia dwuelektronowej funkcji falowej $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, która zgodnie z metodą mieszania konfiguracji posiada postać liniowej kombinacji wyznaczników Slatera

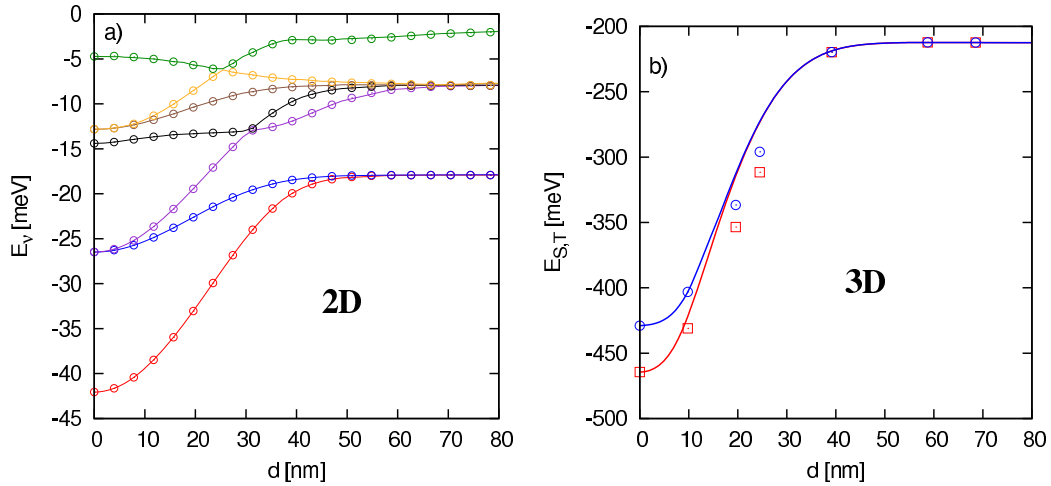
$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C \sum_{n=1}^{N_S} c_n \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (\text{A.5})$$

gdzie C jest stałą normalizacyjną.

W ostatnim etapie obliczeń zdiagonalizowano macierz hamiltonianu (2.5) w bazie (A.4). Elementy macierzowe oddziaływania elektron-elektron zostały policzone numerycznie na siatce przestrzennej [107]. W wyniku rozwiązania problemu własnego otrzymano energie stanów singletowego i trypletowego oraz współczynniki liniowe c_n . W obliczeniach stanów dwuelektronowych wykorzystywano do $N_\nu = 13$ stanów jednoelektronowych, co pozwalało utworzyć maksymalnie $N_S = 169$ wyznaczników Slatera o określonej wartości z-owej składowej spinu. Liczba punktów dwuwymiarowej siatki przestrzennej

wynosiła $M \times N = 123 \times 91 = 11193$.

W celu sprawdzenia dokładności stosowanej w obliczeniach metody numerycznej porównano wyniki otrzymane tą metodą z wynikami dla kropek kwantowych z gaussowskim potencjałem uwięzienia, które otrzymano przy użyciu dokładnej metody wariacyjnej z analitycznie obliczonymi elementami macierzowymi. Rysunek A.2 pokazuje porównanie wyników otrzymanych dla potencjału uwięzienia Gaussa za pomocą metody wariacyjnej ze wszystkimi elementami macierzowymi liczonymi analitycznie i stosowanej w tej pracy metody obliczeniowej, w której wszystkie elementy macierzowe liczone były numerycznie na siatce przestrzennej. Rysunek A.2(a) przedstawia porównanie energii jednoelektronowych w układzie dwuwymiarowych sprzężonych kropek kwantowych. Widać, że otrzymane wyniki bardzo dobrze zgadzają się ze sobą niezależnie od odległości pomiędzy kropkami. Rysunek A.2(b) przedstawia wyniki obliczeń energii dwuelektronowego stanu singletowego i trypletowego dla trójwymiarowych sferycznych kropek kwantowych. Dla $d = 0$ i $d > 40$ nm obie metody prowadzą do takich samych wyników. Natomiast w obszarze pośrednich odległości pomiędzy środkami potencjału uwięzienia



Rysunek A.2: Porównanie wyników otrzymanych za pomocą analitycznej metody wariacyjnej (linie ciągłe) i stosowanej w tej pracy numerycznej metody wariacyjnej (symbole) dla a) energii jednoelektronowych w układzie 2D sprzężonych kropek kwantowych i b) energii stanu singletowego (czerwone linie i symbole) i trypletowego (niebieskie linie i symbole) w układzie 3D sferycznie symetrycznych kropek kwantowych w funkcji odległości d pomiędzy środkami kropek kwantowych dla potencjału gaussowskiego ($p = 2$).

stosowana w tej pracy metoda numeryczna prowadzi do nieco niższych oszacowań całkowitej energii stanów singletowego i trypletowego.

Przedstawiony powyżej schemat rozwiązywania równania Schrödingera ma następujące zalety:

1. Pozwala na rozwiązanie problemu własnego dla dowolnego kształtu potencjału uwięzienia, także do nanoukładów znajdujących się w niejednorodnym polu elektrycznym. W szczególności można ten schemat zastosować do układów składających się z trzech, czterech lub większej liczby sprzężonych kropek kwantowych.
2. Pozwala rozwiązać problem własny dla realistycznych potencjałów uwięzienia, w których pole elektryczne ma skończony zasięg (2.3). Jeżeli pole elektryczne nie jest zbyt silne, to mamy zawsze doczynienia ze stanami związanymi. W przypadku zwykle czynionego [34] założenia nieskończonego zasięgu pola elektrycznego: $\Delta U = -eFx$ dla $-\infty < x < +\infty$, a zatem dla dowolnego pola elektrycznego F stany elektronowe są niezwiązane.
3. W łatwy sposób można dokonać rozszerzenia metody obliczeń do układów kilkuelektronowych oraz do układów trójwymiarowych. Liczba punktów trójwymiarowej siatki przestrzennej używanej w obliczeniach w tej pracy wynosiła $51 \times 51 \times 121$, czyli 314721 punktów.

Bibliografia

- [1] Loss D and DiVincenzo D P *Phys. Rev. A* **57** (1998) 120
- [2] Burkard G, Loss D and DiVincenzo D P *Phys. Rev. B* **59** (1999) 2070
- [3] Elzerman J M, Hanson R, Greidanus J S, Willems van Beveren L H, De Franceschi S, Vandersypen L M K, Tarucha S and Kouwenhoven L P *Phys. Rev. B* **67** (2003) 161308(R)
- [4] Elzerman J M, Hanson R, Willems van Beveren L H, Vandersypen L M K and Kouwenhoven L P *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 4617
- [5] Burkard G, Seelig G and Loss D *Phys. Rev. B* **62** (2000) 2581
- [6] Petta J R, Johnson A C, Taylor J M, Laird E A, Yacoby A, Lukin M D, Marcus C M, Hanson M P and Gossard A C *Science* **309** (2005) 2180
- [7] Moskal S, Bednarek S and Adamowski J *Phys. Rev. A* **76** (2007) 032302
- [8] Taylor J M, Petta J R, Johnson A C, Yacoby A, Marcus C M and Lukin M D *Phys. Rev. B* **76** (2007) 035315
- [9] Hayashi T, Fujisawa T, Cheong H D, Jeong Y H and Hirayama Y *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 226804
- [10] Hatano T, Stopa M and Tarucha S *Science* **309** (2005) 268
- [11] Hatano T, Amaha S and Kubo T, Tokura Y, Nishi Y, Hirayama Y, Tarucha S *Phys. Rev. B* **77** (2008) 241301(R)
- [12] Meunier T, Vink I T, Willems van Beveren L H, Koppens F H L, Tranitz H P, Wegscheider W, Kouwenhoven L P and Vandersypen L M K *Phys. Rev. B* **74** (2006) 195303
- [13] Tarucha S, Austing D G, Tokura Y, van der Wiel W G and Kouwenhoven L P *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 2485

- [14] Laird E A, Petta J R, Johnson A C, Marcus C M, Yacoby A, Hanson M P and Gossard A C *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 056801
- [15] Fuhrer A, Fasth C and Samuelson L *Appl. Phys. Lett.* **91** (2007) 052109
- [16] Björk M T, Fuhrer A, Hansen A E, Larsson M W Fröberg L E and Samuelson L *Phys. Rev. B* **72** (2005) 201307(R)
- [17] Wensauer A, Steffens O, Suhrke M and Rössler U *Phys. Rev. B* **62** (2000) 2605
- [18] Rontani M, Amaha S, Muraki K, Mahghi F, Molinari E, Tarucha S and Austing D G *Phys. Rev. B* **69** (2008) 085327
- [19] Nagaraja S, Leburton J P and Martin R M *Phys. Rev. B* **60** (1999) 8759
- [20] A. Harju A, S. Siljamäki S and R.M. Nieminen R M *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 226804
- [21] Marlo M, Harju A and Nieminen R M *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 187401
- [22] Hu X and Das Sarma S *Phys. Rev. A* **61** (2000) 062301
- [23] Popsueva V, Nepstad R, Birkenland T, Førre M, Hansen J P, Lindroth E and Waltersson *Phys. Rev. B* **76** (2007) 035303
- [24] Bellucci D, Rontani M, Troiani F, Goldoni G and Molinari E *Phys. Rev. B* **69** (2004) 201308(R)
- [25] Melnikov D V and Leburton J P *Phys. Rev. B* **73** (2006) 085320
- [26] Szafran B, Peeters F M and Bednarek S *Phys. Rev. B* **70** (2004) 205318
- [27] Zhang L X, Melnikov D V and Leburton J P *IEEE Trans. Nanotechnology* **6** (2007) 250
- [28] Pedersen J, Flindt C, Mortensen N A and Jauho A P *Phys. Rev. B* **76** (2007) 125323
- [29] Zhang L X, Melnikov D V, Agarwal S and Leburton J P *Phys. Rev. B* **78** (2008) 035418
- [30] Kwaśniewski A and Adamowski J *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 215208
- [31] Ranjan V, Pandey R K, Harbola Manoj K and Singh Vijay A *Phys. Rev. B* **65** (2002) 045311

- [32] Zhang L X, Melnikov D V and Leburton J P *Phys. Rev. B* **78** (2008) 085310
- [33] Zhang L X, Melnikov D V and Leburton J P *J. Phys.: Condens. Matter* **B 21** (2009) 095502
- [34] Nowak M P, Szafran B and Peeters F M *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 395225
- [35] Mizel A and Lidar D A *Phys. Rev. B* **70** (2004) 115310
- [36] Bednarek S, Szafran B, Lis K and Adamowski J *Phys. Rev. B* **68** (2003) 155333
- [37] Adamowski J, Bednarek S and Szafran B *Handbook of Semiconductor Nanostructures and Nanodevices* ed. Balandin A A and Wang K L (American Scientific Publishers, CA, USA) **1** (2006) 389
- [38] Bednarek S, Lis K and Szafran B *Phys. Rev. B* **77** (2008) 115320
- [39] Kouwenhoven L P, Schön G and Sohn L L *Proc. ASI on Mesoscopic Electron Transport* (1997) ed. Sohn L L, Kouwenhoven L P and Schön G (Dordrecht: Kluwer)
- [40] van der Wiel W G, De Franceschi S, Elzerman J M, Fujisawa T, Tarucha S and Kouwenhoven L P *Rev. Mod. Phys.* **75** (2003) 1
- [41] Waugh F R, Berry M J, Mar D J, Westervelt R M, Campman K L and Gossard A C *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995) 705
- [42] Livermore C, Crouch C H, Westervelt R M, Campman K L and Gossard A C *Science* **274** (1996) 1332
- [43] Ciorga M, Sachrajda A S, Hawrylak P, Gould C, Zawadzki P, Jullian S, Feng Y and Wasilewski Z *Phys. Rev. B* **61** (2000) R16315
- [44] Pioro-Ladrière M, Ciorga M, Lapointe J, Zawadzki P, Korkusiński M, Hawrylak P and Sachrajda A S *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 026803
- [45] Petta J R, Johnson A C, Marcus C M, Hanson M P and Gossard A C *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 186802
- [46] Ciurla M, Adamowski J, Szafran B and Bednarek S *Physica E* **15** (2002) 261

- [47] Mlinar V, Schliwa A, Bimberg D and Peeters F M *Phys. Rev. B* **75** (2007) 205308
- [48] Zhang L X, Melnikov D V and Leburton J P *Phys. Rev. B* **74** (2006) 205306
- [49] Kwaśniowski A and Adamowski J *J. Phys.: Condens. Matter* **21** (2009) 235601
- [50] Björk M T, Fuhrer A, Hansen A E, Larsson M W, Fröberg L E and Samuelson L *Phys. Rev. B* **72** (2005) 201307(R)
- [51] Davies K T R, Flocard H, Krieger S and Weiss M S *Nucl. Phys. A* **342** (1980) 111
- [52] Yannouleas C and Landman U *Eur. Phys. J. D* **16** (2001) 373
- [53] Kim G H, Nicholls J T, Khondaker S I, Farrer I and Ritchie D A *Phys. Rev. B* **61** (2000) 10910
- [54] de Menezes F D, Basil A G Jr, Moreira W L, Barbosa L C, Cesar C L, de C Ferreira R, de Farias P M A, Santos B *Microelectron. J.* **36** (2005) 989
- [55] Kwaśniowski A and Adamowski J *Phys. Stat. Sol. C* **6** (2009) 821
- [56] Shinkai G, Hayashi T, Hirayama Y and Fujisawa T *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 103116
- [57] Barenco A, Bennett C H, Cleve R, DiVincenzo D P, Margolus N, Shor P, Sleator T, Smolin J A and Weinfurter H *Phys. Rev. A* **52** (1995) 3457
- [58] Nielsen M A and Chuang I L *Quantum computation and quantum information* Cambridge University Press (2000)
- [59] diVincenzo D P *Proc. R. Soc. Lond. A* **454** (1998) 261
- [60] Bednarek S, Szafran B *Phys. Rev. B* **73** (2006) 155318
- [61] Kapusta J *Wpływ potencjału indukowanego w gazie elektronowym na dekoherencję elektronowych stanów kwantowych* (2007) praca magisterska
- [62] Fiederling R, Keim M, Reuscher G, Ossau W, Schmidt G, Waag A and Molenkamp L W *Nature* **402** (1999) 787

- [63] Ohno Y, Young D K, Beschoten B, Matsukura F, Ohno H and Awschalom D D *Nature* **402** (1999) 790
- [64] Friesen M, Tahan C, Joynt R and Eriksson M A *Phys. Rev. Lett.* B **92** (2004) 037901
- [65] Wagner M *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 4010
- [66] Field M, Smith C G, Pepper M, Ritchie D A, Frost J E F, Jones G A C and Hasko D G *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993) 1311
- [67] Hanson R, Witkamp B, Vandersypen L M K, Willems van Beveren L H, Elzerman J M and Kouwenhoven L P *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 196802
- [68] Elzerman J M, Hanson R, van Beveren L H W, Witkamp B, Vandersypen L M K and Kouwenhoven L P *Nature* **430** (2004) 431
- [69] Gorman J, Hasko D G and Williams D A *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 090502
- [70] Gilad T and Gurvitz S A *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 116806
- [71] Recher P, Sukhorukov E V and Loss D *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1962
- [72] Coish W A and Loss D *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials* ed. Kronmüller H and Parkin S (Wiley) **5** (2007)
- [73] Coish W A, Golovach V N, Egues J C and Loss D *phys. stat. sol. (b)* **243** No. 14 (2006) 3658
- [74] diVincenzo D P *Fortschr. Phys.* **48** (2000) 9-11, 771
- [75] Winkler R *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 91 (2003)
- [76] Khaetskii A V and Nazarov Yu V *Phys. Rev. B* **61** (2000) 12639
- [77] Khaetskii A V and Nazarov Yu V *Phys. Rev. B* **64** (2001) 125316
- [78] Coish W A and Loss D *Phys. Rev. B* **72** (2005) 125337
- [79] Khaetskii A V, Loss D and Glazman L *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 186802
- [80] Khaetskii A V, Loss D and Glazman L *Phys. Rev. B* **67** (2003) 195329
- [81] Schliemann J, Khaetskii A V and Loss D *J. Phys.: Condens. Matter* **17** (2005) 4489

- [82] Schliemann J, Khaetskii A V and Loss D *Phys. Rev. B* **66** (2002) 245303
- [83] Cerletti V, Coish W A, Gywat O and Loss D *Nanotechnology* **16** (2005) R27
- [84] Miller J B, Zumbühl D M, Marcus C M, Lyanda-Geller Y B, Goldhaber-Gordon D, Campman K and Gossard A C *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 076807
- [85] Paget D, Lampel G, Sapoval B and Safarov V I *Phys. Rev. B* **15** (1977) 5780
- [86] Devreese J T *Encyclopedia of Applied Physics* vol **14**, New York: VCH (1996) p 383
- [87] Adamowski J *Phys. Rev. B* **39** (1989) 3649
- [88] Adamowski J and Bednarek S *J. Phys.: Condens. Matter* **4** (1992) 2845
- [89] Jacak L, Krasnyj J, Jacak W, Gonczarek R and Machnikowski P *Phys. Rev. B* **39** (1989) 3649
- [90] Adamowski J *Phys. Rev. B* **39** (1989) 13061
- [91] Adamowski J, Kwaśniowski A and Szafran B *J. Phys.: Condens. Matter* **17** (2005) 4489
- [92] Bednarek S and Szafran B *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008) 216805
- [93] Bednarek S, Szafran B *Nanotechnology* **20** (2009) 065402
- [94] Florescu M and Hawrylak P *Phys. Rev. B* **73** (2006) 045304
- [95] Dresselhaus G *Phys. Rev.* **100** (1955) 580
- [96] Bonesteel N E and Stepanenko D *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 207901
- [97] Stepanenko D and Bonesteel N E *Phys. Rev. B* **68** (2003) 115306
- [98] Burkard G and Loss D *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 047903
- [99] Golovach V N, Khaetskii A and Loss D. *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 016601
- [100] Fasth C, Fuhrer A, Samuelson L, Golovach V N and Loss D *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 266801

- [101] Merkulov I A, Efros A L and Rosen M *Phys. Rev. B* **65** (2002) 205309
- [102] Coish W A and Loss D *Phys. Rev. B* **70** (2004) 195340
- [103] Friesen M, Rugheimer P, Savage D E, Lagally M G, van der Weide D W, Joynt R and Eriksson M A *Phys. Rev. B* **67** (2003) 121301
- [104] Slinker K A, Lewis K L M, Haselby C C, Goswami S, Klein L J, Chu J O, Coppersmith S N, Joynt R, Blick R H, Friesen M and Eriksson M A *New J. Phys.* **7** (2005) 246
- [105] Tyryshkin A M, Lyon S A, Astashkin A V and Raitsimring A M *Phys. Rev. B* **68** (2003) 193207
- [106] Chwiej T and Szafran B *Phys. Rev. B* **79** (2009) 085305
- [107] Lis K *Elektrostatyczne potencjały uwięzienia w kropkach kwantowych* (2006) praca doktorska, <http://www.zftik.agh.edu.pl/prace/Lis.pdf>