

OSCYLACJE ELEKTRONOWE W UKŁADZIE ZŁOŻONYM Z KROPEK KWANTOWYCH ORAZ DOPROWADZEŃ - ANALIZA NUMERYCZNA

Paweł Tchórzewski

Net-Art, ul. Lotnicza 3, 20-322 Lublin

Streszczenie. W niniejszej pracy analizowane jest zjawisko oscylacji elektronowych w układzie, który składa się z dwóch kropek kwantowych oraz dwóch doprowadzeń. Elementy te są ze sobą sprzężone szeregowo. Model matematyczny rozważanego systemu opiera się na metodzie równania ruchu dla odpowiednich funkcji korelacyjnych. W obliczeniach uwzględniono oddziaływania kulombowskie pomiędzy elektronami zlokalizowanymi na kropkach kwantowych oraz spin elektronu. Zbadany został wpływ wybranych parametrów układu na czasową zależność prawdopodobieństwa obsadzenia poziomów energetycznych kropek kwantowych.

Słowa kluczowe: mechanika kwantowa, kropki kwantowe, oscylacje elektronowe, metody numeryczne

ELECTRON OSCILLATIONS IN A QUANTUM DOT SYSTEM – NUMERICAL ANALYSIS

Abstract. Electron oscillations phenomena in a system composed of two quantum dots and two leads coupled in series has been analysed. The mathematical model of the discussed system is based on the equation of motion method for appropriate correlation functions. The Coulomb interactions between electrons localised on quantum dots and electron spin have been taken into account in the calculations. The influence of the selected system parameters on a time-dependent probability of quantum dot energy level occupation has been researched.

Keywords: quantum mechanics, quantum dots, electron oscillations, numerical methods

Wstęp

Wiele różnorodnych zjawisk zachodzących w układach zbudowanych z kropek kwantowych było w ostatnich latach przedmiotem intensywnych badań. Przykładowo bardzo wiele uwagi poświęcono zjawisku transportu elektronowego dla przypadków stacjonarnych [2, 3]. Zasadność badań systemów niskowymiarowych często jest motywowana możliwością praktycznego wykorzystania zdobytych informacji na przykład w spintronice do zbudowania komputera kwantowego lub innych urządzeń.

W niniejszej pracy rozważamy zjawisko oscylacji elektronowych. Aby wyjaśnić jego istotę weźmy pod uwagę następujący przykład. Załóżmy, że w układzie złożonym z dwóch jednopoziomowych kropek kwantowych, który bywa nazywany kubitem znajduje się tylko jeden elektron. Ponadto zakładamy, że w chwili początkowej elektron był zlokalizowany na jednej z kropek. Wykonując obliczenia analityczne można wykazać [1], że prawdopodobieństwo znalezienia elektronu na dowolnej z kropek kwantowych zmienia się okresowo z czasem. Okres takich oscylacji wynosi:

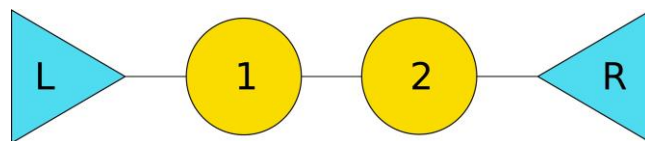
$$T_o = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4|V_{12}|^2}}, \quad (1)$$

gdzie ε_1 , ε_2 to energie poziomów jednocząstkowych, natomiast parametr V_{12} oznacza element macierzy, którego wartość zależy od kształtu i rozmiarów bariery potencjału między kropkami.

Używając formalizmu drugiej kwantyzacji oraz metody równania ruchu dla odpowiednich funkcji korelacyjnych badamy wpływ sprzężenia pomiędzy elementami układu, a także wpływ oddziaływań kulombowskich na przebieg zjawiska oscylacji elektronowych zachodzących w kubicie. Każda z dwóch kropek kwantowych w badanym układzie dla czasu $t > 0$ jest sprzężona z metalicznym doprowadzeniem, które stanowi pewnego rodzaju rezerwuuar elektronowy (rysunek 1). Zakładamy, że w chwili czasu $t = 0$ poszczególne elementy systemu nie są ze sobą połączone. Zastosowana przez nas metoda pozwala na wyznaczenie

prawdopodobieństwa obsadzenia poziomów energetycznych kropek kwantowych w zależności od czasu.

W kolejnych częściach artykułu został przedstawiony zastosowany do opisu zjawiska oscylacji model matematyczny oraz zaprezentowano wyniki obliczeń numerycznych wraz z ich dyskusją.



Rys. 1. Schemat reprezentujący badany układ. Trójkąty oznaczają doprowadzenia, natomiast koła reprezentują kropki kwantowe

1. Formalizm teoretyczny

Na wstępie wybieramy taki układ jednostek, aby $e = \hbar = 1$, gdzie e jest wartością bezwzględną ładunku elektronu, natomiast \hbar oznacza zredukowaną stałą Plancka. Wybór ten podyktowany jest względami praktycznymi.

Rozważany układ przedstawia schematycznie rysunek 1. Operator energii całkowitej tego układu w reprezentacji liczb obsadzeń przyjmuje postać: $H = H_{DQD} + H_{LR} + H_C$, gdzie

$$H_{DQD} = \sum_{j=1,2} \sum_{\sigma} \varepsilon_{j\sigma} n_{j\sigma} + \sum_{\sigma} (V_{12} c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + V_{12}^* c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) + \sum_{j=1,2} U_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + U_{12} \sum_{\sigma, \sigma'} n_{1\sigma} n_{2\sigma'} \quad (2)$$

$$H_{LR} = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}\sigma} n_{\alpha\mathbf{k}\sigma}, \quad (3)$$

$$H_C = \sum_{j=1,2} \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [V_{\alpha\mathbf{k}}^{(j)} c_{j\sigma}^+ c_{\alpha\mathbf{k}\sigma} + (V_{\alpha\mathbf{k}}^{(j)})^* c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}^+ c_{j\sigma}], \quad (4)$$

oraz $V_{\mathbf{k}}^{(2)} = V_{\mathbf{k}}^{(1)} \equiv 0$. Wyraz H_{DQD} opisuje dwie połączone ze sobą kropki kwantowe, H_{LR} odnosi się do elektrod, natomiast H_C odpowiada za sprzężenie pomiędzy kropkami kwantowymi, a elektrodami. Operatory kreacji oraz anihilacji elektronu

w odpowiednich stanach właściwych dla doprowadzeń reprezentowane są odpowiednio przez $c_{\alpha k \sigma}^+$ oraz $c_{\alpha k \sigma}$, \mathbf{k} oznacza wektor falowy elektronu, natomiast rzut spinu oznaczono symbolem σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$). $\varepsilon_{\alpha k \sigma}$ reprezentuje energię elektronu w doprowadzeniu α w określonym stanie tej cząstki. Operatory kreacji oraz anihilacji dla stanów kropek kwantowych to odpowiednio $c_{j\sigma}^+$ i $c_{j\sigma}$. Energie dla tych stanów oznaczono jako $\varepsilon_{j\sigma}$. Parametry U_1 , U_2 , U_{12} odpowiadają za intensywność oddziaływań kulombowskich. Współczynnik $V_{\alpha k}^{(j)}$ opisuje sprzężenie pomiędzy doprowadzeniem α , a j -tą kropką kwantową. Niezerowa wartość parametru V_{12} oznacza, że elektrony mogą tunelować pomiędzy kropkami kwantowymi. Operatory liczby cząstek zostały oznaczone jako $n_{j\sigma}$ oraz $n_{\alpha k \sigma}$.

Dla danego w obrazie Heisenberga operatora $A(t)$, który w obrazie Schrödingera jawnie nie zależy od czasu, równanie ruchu może być zapisane jako

$$i \frac{dA(t)}{dt} = [A(t), H(t)]. \quad (5)$$

Na podstawie metody równania ruchu dla odpowiednich funkcji korelacyjnych otrzymujemy następujące równanie różniczkowe na prawdopodobieństwo obsadzenia stanu o spinie σ w pierwszej kropce kwantowej

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n_{1\sigma}(t) \rangle}{dt} = & 2 \operatorname{Im} \left[V_L^{(1)}(t) \sum_{\mathbf{k}} \exp \left(-i \int_0^t \varepsilon_{Lk\sigma}(t_1) dt_1 \right) \langle c_{1\sigma}^+(t) c_{Lk\sigma}(0) \rangle \right] \\ & + 2 \operatorname{Im} \left[-\frac{i}{2} \Gamma_L(t, t) \langle n_{1\sigma}(t) \rangle + V_{12}(t) \langle c_{1\sigma}^+(t) c_{2\sigma}(t) \rangle \right], \end{aligned} \quad (6)$$

gdzie symbol $\langle \dots \rangle$ oznacza wartość średnią w rozumieniu kwantowo-statystycznym, $\Gamma_L(t, t) = 2\pi \rho_L |V_L^{(1)}(t)|^2$ przy czym ρ_L jest gęstością stanów dla doprowadzenia L. Ponadto zostało przyjęte założenie, że elementy macierzowe $V_{\alpha k}^{(j)}$ nie zależą od wektora falowego \mathbf{k} , to znaczy $V_{\alpha k}^{(j)} \equiv V_{\alpha}^{(j)}$. W celu określenia prawdopodobieństwa obsadzenia poziomów kropek kwantowych należy wyznaczyć funkcje $\langle c_{j\sigma}^+(t) c_{\alpha k \sigma}(0) \rangle$ oraz $\langle c_{1\sigma}^+(t) c_{2\sigma}(t) \rangle$. Aby tego dokonać po raz kolejny posługujemy się równaniem ruchu operatora (5). Procedurę wyznaczania kolejnych równań na funkcje korelacyjne należy powtarzać dotąd, aż otrzymany układ równań różniczkowych zwyczajnych będzie układem zamkniętym. W przypadku rozważanego systemu występują dwa typy funkcji korelacyjnych. Pierwsza grupa to funkcje zbudowane tylko z operatorów kreacji oraz anihilacji dla stanów kropek kwantowych. Druga grupa obejmuje funkcje, które można zapisać w ogólnej postaci:

$$\langle f_1(c_{j\sigma}^+(t), c_{j'\sigma}(t)) c_{\alpha k \sigma}(0) \rangle,$$

gdzie $f_1(c_{j\sigma}^+, c_{j'\sigma})$ jest daną funkcją operatorów $c_{j\sigma}^+$ oraz $c_{j'\sigma}$. Funkcje pierwszego typu tworzą zamknięty układ równań różniczkowych. Równania te zawierają jednak wyrazy stanowiące sumy funkcji drugiego rodzaju. Ponieważ równania różniczkowe na funkcje korelacyjne takiego typu nie tworzą zamkniętego układu równań, więc konieczne staje się dokonanie przybliżeń.

Funkcje korelacyjne zbudowane z dwóch operatorów wziętych dla $t = 0$ zostały przybliżone w następujący sposób:

$$\begin{aligned} & \langle f_2(c_{j_1\sigma_1}^+(t), c_{j_2\sigma_2}(t)) c_{\alpha k \sigma}(0) c_{\alpha' k' \sigma'}(0) \rangle \\ & \approx \langle f_2(c_{j_1\sigma_1}^+(t), c_{j_2\sigma_2}(t)) \rangle \langle c_{\alpha k \sigma}(0) c_{\alpha' k' \sigma'}(0) \rangle \\ & \equiv \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \langle f_2(c_{j_1\sigma_1}^+(t), c_{j_2\sigma_2}(t)) \rangle \langle n_{\alpha k \sigma}(0) \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

gdzie $f_2(c_{j_1\sigma_1}^+, c_{j_2\sigma_2})$ jest daną funkcją operatorów $c_{j_1\sigma_1}^+$ oraz $c_{j_2\sigma_2}$, natomiast $\delta_{ww'}$ oznacza deltę Kroneckera. Ponieważ w chwili początkowej układ znajduje się w stanie równowagowym, więc średnia $\langle n_{\alpha k \sigma}(0) \rangle$ reprezentuje rozkład Fermiego-Diraca.

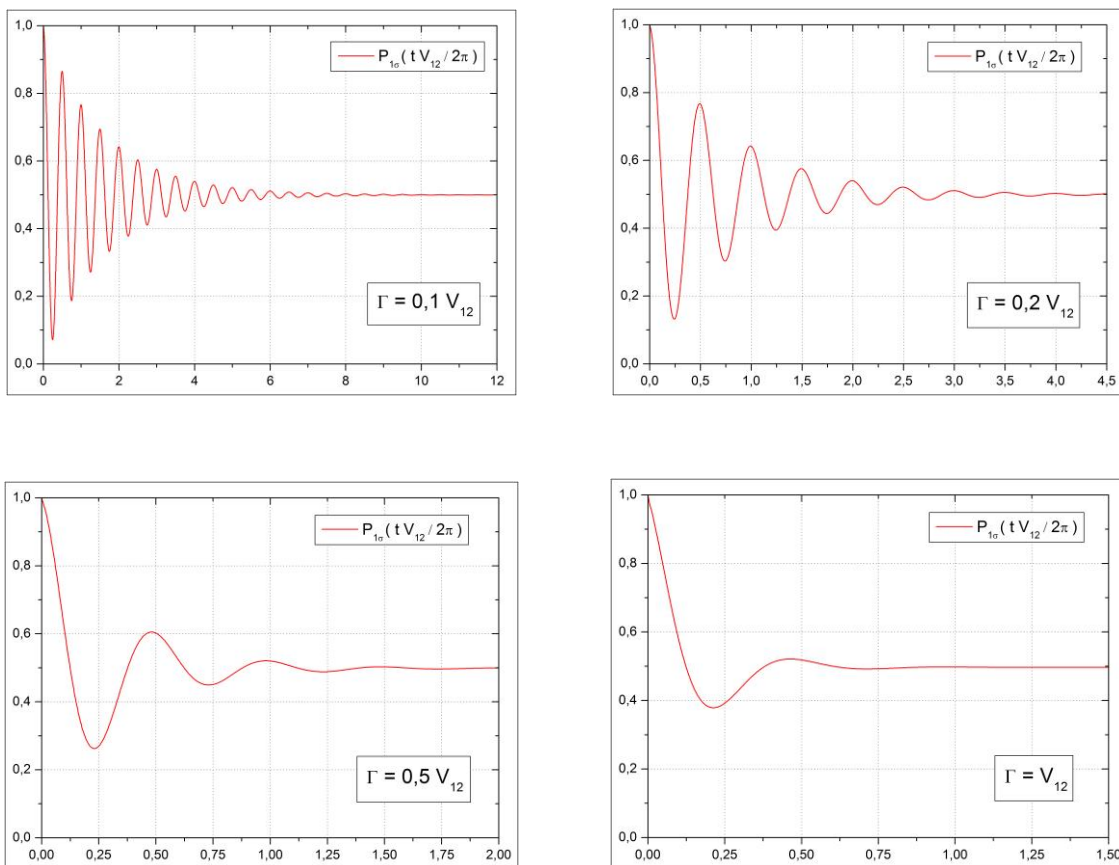
Powyższa procedura przybliżeń nie łamie najbardziej istotnych korelacji między elektronami. Otrzymany w przedstawiony sposób układ równań różniczkowych zwyczajnych był dla wybranych parametrów rozwiązywany numerycznie za pomocą metody Rungego-Kutty czwartego rzędu.

2. Wyniki obliczeń numerycznych

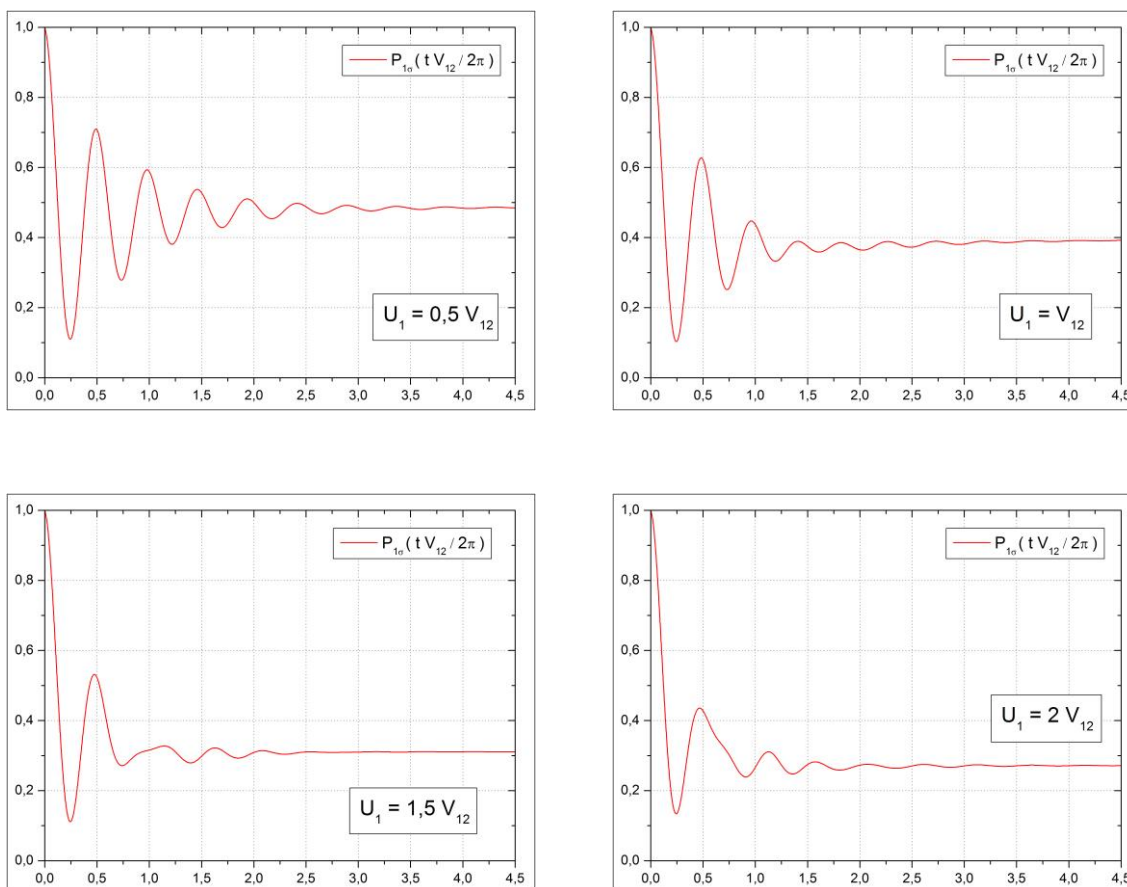
Na potrzeby obliczeń numerycznych zostało przyjęte założenie $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma$. Za jednostkę energii wybieramy V_{12} , natomiast jednostką czasu jest $(2\pi)/V_{12}$. Potencjały chemiczne elektrod i energie poziomów kropek kwantowych wynoszą odpowiednio $\mu_L = \mu_R = 0$ oraz $\varepsilon_{j\sigma} = 0$. Iloczyn stałej Boltzmana i temperatury układu jest równy $k_B T = 10^{-4} V_{12}$. Między parametrami opisującymi intensywność oddziaływań kulombowskich zachodzi relacja $U_1 = U_2 = 2U_{12}$.

Wykresy obecne na rysunku 2 pokazują nam, że im większa jest wartość parametru Γ , to tym szybciej następuje tłumienie oscylacji. Jednak za każdym razem prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o wybranym rzucie spinu na pierwszej kropce kwantowej jest w stanie równowagowym takie samo i wynosi w przybliżeniu $P_{1\sigma} = 0,5$. Zgodnie ze wzorem (1) okres oscylacji elektronowych w kubicie nie podłączonym do elektrod ($\Gamma = 0$) wynosi $0,5 \cdot (2\pi)/V_{12}$. Przy zaniedbaniu oddziaływań między elektronami wyniki obliczeń numerycznych pokazują, że dla $\Gamma = 0,1 V_{12}$ i $\Gamma = 0,2 V_{12}$ nie jest widoczny wpływ tego parametru na okres oscylacji. Gdy $\Gamma = 0,5 V_{12}$ i $\Gamma = V_{12}$ to ten wpływ jest stosunkowo niewielki.

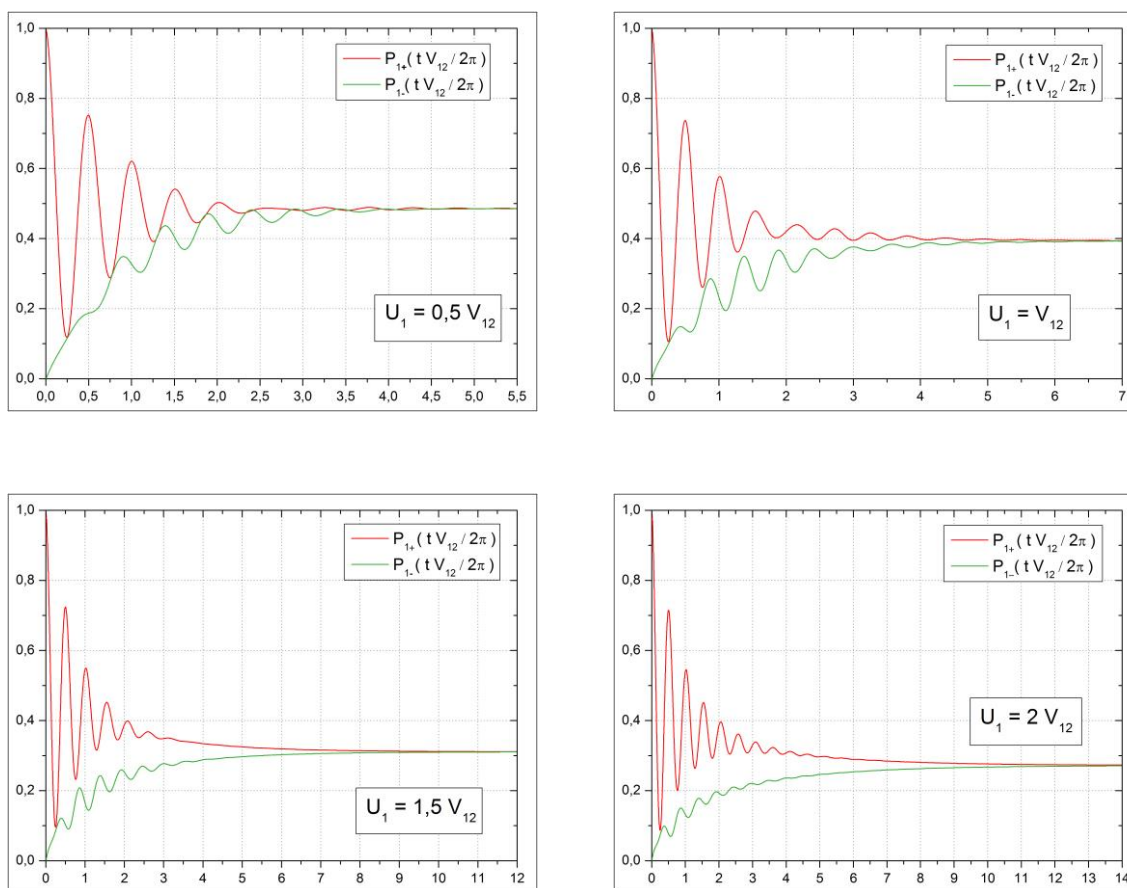
Na podstawie rysunków 3 oraz 4 wyciągamy wniosek, że warunki początkowe mają istotne znaczenie dla przebiegu oscylacji w realnych układach, w których mamy obecność oddziaływań kulombowskich. W pierwszej kolejności weźmy pod uwagę przypadek $U_1 = 0,5 V_{12}$. Widzimy, że czas po którym następuje wytłumienie oscylacji jest słabo zależny od wyboru warunków początkowych. Dla $U_1 > 0,5 V_{12}$ prawidłowość ta przestaje już obowiązywać. Gdy w chwili początkowej w kubicie na jednej z kropek kwantowych znajdują się dwa elektrony, to stosunkowo szybko układ przechodzi do stanu równowagowego. Odmienna sytuacja ma miejsce gdy w chwili $t = 0$ w kubicie mamy tylko jeden elektron. Wówczas po czasie równym kilku okresom oscylacji następuje ich zanik. Ponadto w tym przypadku wzrost wartości parametrów związanych z oddziaływaniami kulombowskim prowadzi do zwiększenia się czasu relaksacji. Śledząc położenia ekstremów funkcji, których wykresy omawiamy widzimy, że oddziaływania między elektronami mają pewien wpływ na okres zmian prawdopodobieństwa. Nie jest on jednak zbyt znaczący.



Rys. 2. Wykresy przedstawiają prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o dowolnym rzucie spinu na pierwszej kropce kwantowej w zależności od czasu. Zakładamy, że w chwili czasu $t=0$ poziomy energetyczne pierwszej kropki kwantowej są obsadzone, natomiast poziomy kropki drugiej są puste. W obliczeniach zostało przyjęte założenie, że oddziaływania kulombowskie są zanedbywalnie małe ($U_1=0$)



Rys. 3. Prawdopodobieństwo detekcji elektronu o dowolnym rzucie spinu na pierwszej kropce kwantowej w funkcji czasu. Współczynnik odpowiadający za sprzężenie kropek z doprowadzeniami wynosi $\Gamma=0,2 V_{12}$. Warunki początkowe na obsadzenia są takie, jak to zostało podane w opisie rysunku 2



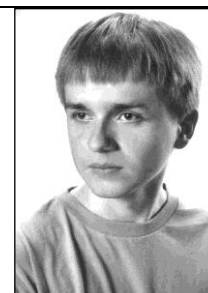
Rys. 4. Prawdopodobieństwo detekcji elektronów na pierwszej kropce kwantowej w zależności od czasu. We wszystkich czterech przypadkach $\Gamma = 0,2 V_{12}$. Krzywe oznaczone kolorem czerwonym oraz zielonym odpowiadają stanom dla których rzut spinu jest odpowiednio dodatni (\uparrow) oraz ujemny (\downarrow). W chwili początkowej w kubicie znajdował się tylko jeden elektron, a rzut jego spinu był dodatni

Literatura

- [1] Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloë F.: Quantum mechanics, Wiley-Interscience, New York, 1977.
- [2] Jauho A. P., Wingreen N. S., Meir Y.: Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems, Phys. Rev. B, Vol.: 50, 1994.
- [3] Sun Z. Z., Zhang R. Q., Fan W., Wang X. R.: Resonance and antiresonance effects in electronic transport through several-quantum-dot combinations, J. Appl. Phys., Vol. 105, 2009.

Mgr Paweł Tchórzewski
e-mail: pawel.tchorzewski87@gmail.com

W 2011 roku Paweł Tchórzewski ukończył studia na kierunku fizyka (specjalność: fizyka teoretyczna) na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. Aktualnie jest zatrudniony w lubelskiej firmie Net-Art, gdzie realizując swoje zainteresowania wykonuje prace o charakterze rozwojowo-badawczym głównie w dziedzinie numerycznych metod rozwiązywania równań różniczkowych.



otrzymano/received: 19.06.2013

przyjęto do druku/accepted: 16.02.2014

**INFORMATYKA
AUTOMATYKA
POMIARY**
W GOSPODARCE
I OCHRONIE ŚRODOWISKA

Zapraszamy na naszą stronę internetową:

WWW . IAPGOS . PL

gdzie znajdziecie Państwo:

- informacje nt. zamieszczania reklam,
- wykaz prac opublikowanych w latach 2011 - 2013,
- procedurę recenzowania,
- wykaz recenzentów prac opublikowanych w poprzednich latach,
- aktualną formatkę artykułu oraz druk recenzji,
- dostęp on-line do artykułów.



WWW.IAPGOS.PL