

色散和杂质对双参量非对称高斯势量子点量子比特的影响*

乌云其木格¹⁾ 韩超^{2)†} 额尔敦朝鲁²⁾

1) (内蒙古民族大学物理与电子信息学院, 通辽 028043)

2) (河北科技师范学院凝聚态物理研究所, 秦皇岛 066004)

(2019年6月20日收到; 2019年10月4日收到修改稿)

选取双参量非对称高斯势描写量子点中电子的受限效应, 采用 LLP-Pekar 变换变分法研究了色散和杂质对量子点量子比特性质的影响. 结果表明, 量子点量子比特中电子的概率密度随非对称高斯势阱宽的减小而呈现显著振荡, 并随介电常数比的增加而减小; 量子比特振动周期随高斯势阱深的增加或介电常数比的增加而减小; 退相干时间随介电常数比的增加或色散系数的增加而增大; 相位旋转品质因子随介电常数比的增加或色散系数的增加而增大.

关键词: 量子比特, 非对称高斯势, 概率密度, 振动周期, 退相干时间, 相位旋转品质因子

PACS: 78.67.Hc, 71.38.Fp, 63.20.kd

DOI: 10.7498/aps.68.20190960

1 引言

量子计算的基本原理是利用量子化的二能级系统作为信息处理的基本单元量子比特, 通过对量子态的调控, 完成复杂计算和信息处理. 量子点量子计算机是目前被认为最有希望实现的量子计算机方案之一^[1-4], 量子点中的二能级体系可作为一个量子比特. 影响量子点量子比特的存储、存活、退相干、旋转操控等性质的要素中, 除了位于量子点中电子的三维受限和电声耦合之外, 还应包括量子点自身的品质, 如介电常数比、杂质、色散等. 这些要素都极具研究价值, 且目前亟待理清. 对于量子点中电子的三维受限和电声耦合, 选取合适的受限势函数极为重要. 长期以来, 用单参量的抛物势来描述量子点中电子的受限情况较为普遍^[5-9]. 然而, 抛物势是一种过于简化了的理想模型, 其结果无疑是比较粗糙的. 最近, 一些学者采用高斯势函

数描写电子在低维量子结构中的受限, 这是因为一些实验结果^[10,11]显示电子真实的受限应是非抛物形的阱状势, 而高斯势阱平滑且具有有限的阱深阱宽, 应是一个很好的近似. 然而, 不难发现, 近几年引入高斯限定势研究量子计算机的工作大多集中在量子阱量子比特上^[12-15], 而相关研究在最具实际价值的量子点量子比特领域甚少, 尤其是研究色散、杂质和电声耦合对双参量非对称高斯势量子点量子比特的影响的工作尚未报道. 本文选取双参量非对称高斯势描写量子点中电子的受限效应, 采用 LLP-Pekar 变换变分法研究了色散和杂质对量子点量子比特性质的影响.

2 模型与方法

考察一个位于量子点中三维受限的电子, 设电子在沿量子点生长方向及其垂直方向分别受到不同局域限定势作用, 并与介质中氢化杂质和体纵光

* 国家自然科学基金 (批准号: 51902085) 和内蒙古自治区自然科学基金 (批准号: 2019MS01011) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hc_206@126.com

学 (LO) 声子相互作用, 则量子点中杂质-电子-LO 声子耦合体系的哈密顿量可以写成^[12]:

$$H = \frac{p^2}{2m_b} + V_P(\rho) + V_G(z) + V_C(r) + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\text{LO}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \text{H.c.}), \quad (1)$$

式中

$$V_G(z) = \begin{cases} -V_0 \exp\left(-\frac{z^2}{2L^2}\right), & z \geq 0, \\ \infty, & z < 0, \end{cases} \quad (2)$$

$$V_P(\rho) = \frac{1}{2} m_b \omega_0^2 \rho^2, \quad V_C(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_\infty r},$$

分别表示电子沿量子点生长方向 (z 轴) 及其垂直方向 (xy 平面) 的限定势和电子在氢化杂质电场中的库仑能, 其中, V_0 表示非对称高斯势的阱深且 $V_0 > 0$, L 表示其阱宽, 亦称为量子点的有效厚度. 其余各项各量的物理意义与文献 [12] 相同.

讨论变分函数 $U^{-1}HU$ 在 $|\Psi\rangle$ 态中期待值的变分极值问题, 按照变分原理

$$\delta \bar{H} = \delta \langle \Psi | U^{-1} H U | \Psi \rangle = 0, \quad (3)$$

这里算符 U 是 LLP 么正变换^[16]. 依据 Pekar 类型的变分法^[17], 体系的基态 $|\Psi_0\rangle$ 和第一激发态 $|\Psi_1\rangle$ 试探波函数分别选为

$$|\Psi_0\rangle = \sqrt{2\lambda_0\pi}^{-1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}\lambda_0^2(\rho^2 + z^2)\right] |0_{\text{ph}}\rangle, \quad (4)$$

$$|\Psi_1\rangle = 2\pi^{-1/4}\lambda_1^{3/2}z \exp\left[-\frac{1}{2}\lambda_1^2(\rho^2 + z^2)\right] |0_{\text{ph}}\rangle, \quad (5)$$

其中, λ_0 和 λ_1 为变分参数, $|0_{\text{ph}}\rangle$ 是 LO 声子的真空态, 由 $b_{\mathbf{k}}|0_{\text{ph}}\rangle = 0$ 确定.

将 (4) 和 (5) 式分别代入 (3) 式中, 可导出变分参数 λ_0 和 λ_1 满足的方程如下:

$$\lambda_0^4 - \frac{\omega_0^2}{6} - \frac{V_0}{12L^2} \left(1 + \frac{1}{2L^2\lambda_0^2}\right)^{-3/2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\alpha}{3} \lambda_0^3 - \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{\alpha}{1-\eta} \lambda_0^3 = 0, \quad (6)$$

$$\lambda_1^4 - \frac{\omega_0^2}{10} - \frac{3V_0}{20L^2} \left(1 + \frac{1}{2L^2\lambda_1^2}\right)^{-5/2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{49\alpha}{300} \lambda_1^3 - \frac{8}{15\sqrt{\pi}} \frac{\alpha}{1-\eta} \lambda_1^3 = 0, \quad (7)$$

其中 $\eta = \epsilon_\infty/\epsilon_0$ 称为介电常数比. 利用 λ_0 和 λ_1 并经冗长计算, 可分别得体系的基态和第一激发态能量

$E_0 = \lim \langle \Psi_0 | U^{-1} H U | \Psi_0 \rangle$ 和 $E_1 = \lim \langle \Psi_1 | U^{-1} H U | \Psi_1 \rangle$. 藉此与 (4) 和 (5) 式可以构造一个二能级体系, 当电子处于叠加态

$$\Psi(\rho, z, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\Psi_0\rangle \exp\left(-i\frac{E_0}{\hbar}t\right) + |\Psi_1\rangle \exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right) \right] \quad (8)$$

时, 即构成一个量子点量子比特, 量子比特内电子的概率密度为

$$w(\rho, z, t) = \pi^{-3/2} \left[\lambda_0^3 e^{-\lambda_0^2(\rho^2 + z^2)} + 2\lambda_1^5 z^2 e^{-\lambda_1^2(\rho^2 + z^2)} + 2\sqrt{2}\lambda_0^{3/2}\lambda_1^{5/2} z e^{-\frac{1}{2}(\lambda_0^2 + \lambda_1^2)(\rho^2 + z^2)} \cos(\omega_{01}t) \right], \quad (9)$$

其中, $\omega_{01} = (E_1 - E_0)/\hbar = \Delta E/\hbar$, $\Delta E = E_1 - E_0$ 为体系第一激发态与基态能级间隙. 概率密度 w 随时间的振动周期 T 为

$$T = \frac{h}{E_1 - E_0} = \frac{h}{\Delta E}, \quad (10)$$

$$\Delta E = \hbar\omega_{\text{LO}} \left\{ \frac{1}{2} (5\lambda_1^2 - 3\lambda_0^2) + \frac{\omega_0^2}{4} \left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_0^2} \right) - \frac{4\alpha}{\sqrt{\pi}(1-\eta)} \left(\frac{2\lambda_1}{3} - \lambda_0 \right) - \frac{V_0}{2} \left[\left(1 + \frac{1}{2L^2\lambda_1^2}\right)^{-3/2} - \left(1 + \frac{1}{2L^2\lambda_0^2}\right)^{-1/2} \right] - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \left[\left(\frac{49}{20} + \frac{4}{\pi} \right) \frac{\lambda_1}{3} - \lambda_0 \right] \right\}. \quad (11)$$

考虑到电子的叠加态是不稳定的, 极易受到外界环境的影响, 为此, 我们引进抛物色散关系, 基于费米黄金规则和偶级近似, 在环境保持低温的情况下, 引入声子色散关系^[5,7,18-20] $\omega = \omega_{\text{LO}} - \varsigma ck^2$, 可算得声子的自发辐射率为

$$\tau^{-1} = \frac{e^2\omega_{01}}{2\pi c\epsilon_0\hbar\varsigma} |\langle \Psi_0 | \mathbf{r} | \Psi_1 \rangle|^2 = \frac{e^2\omega_{01}}{2\pi c\epsilon_0\hbar\varsigma} \frac{16\lambda_0^3\lambda_1^5}{(\lambda_0^2 + \lambda_1^2)^5}, \quad (12)$$

其中, τ 为退相干时间, ς 称为色散系数. 借助 (12) 式可以展开对量子比特球的相位旋转 (或称自由旋转) 操控的讨论. 对于一个退相干时间为 τ 的二能级系统, 其量子比特球的相位旋转品质因子 Q 为

$$Q = \frac{\Delta E}{\hbar} \tau. \quad (13)$$

3 结果与讨论

图1—图10给出了非对称高斯势量子点量子比特中电子的概率密度 w 、振动周期 T 、退相干时间 τ 和自由旋转品质因子 Q 的数据曲线, 为了使这些数值曲线呈现的各物理量的变化规律具有普遍性, 图中分别以 ω_{LO}^{-1} , $\hbar\omega_{LO}$ 和 $r_p = \sqrt{\hbar/(2m_0\omega_{LO})}$ 作为时间、能量和长度的单位.

图1表示能隙 ΔE 在高斯势不同阱深 V_0 下随其阱宽 L 的变化. 由图1可以看出, 各 ΔE - L 曲线呈现两头低、中间高 (最大值出现在 $L \approx 0.3r_p$ 处)、左右非对称的显著特点, 属于一种非对称“高斯分布”, 这与本文采用非对称高斯势 $V_G(z)$ 描写电子受限有关. 由图1还可以看出, 在给定 L 下, ΔE 随 V_0 的增加而增大, 这是因为 $|V_G(z)|$ 随 V_0 增加而增大所致.

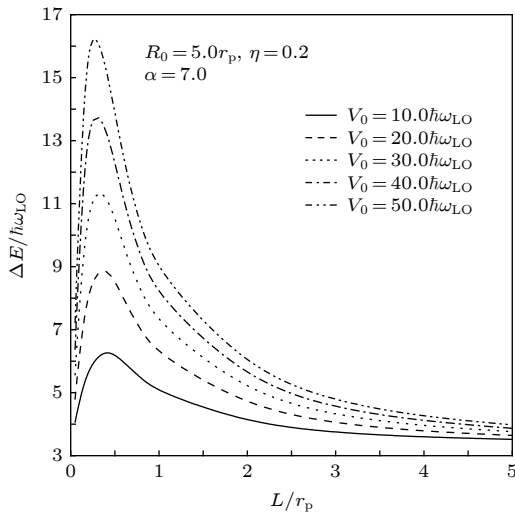


图1 能隙 ΔE 在非对称高斯势不同阱深 V_0 下随阱宽 L 的变化

Fig. 1. Energy gap ΔE versus the well width L under different the well depth V_0 of the asymmetric Gaussian (AG) potential.

图2描绘了能隙 ΔE 在不同介电常数比 η 下随高斯势阱宽 L 的变化. 由图2可以看出, ΔE 随 η 的增加而增大. 这是因为在含氢化杂质的晶体或纳米结构中电子被库仑势 ($V_C < 0$) 束缚于氢化杂质中, 且 η 越大, 杂质-电子库仑势 $V_C \propto -(1-\eta)^{-1}$ 越强.

图3为概率密度 w 在高斯势不同阱深 V_0 下随其阱宽 L 的变化. 由图3可以看出, w 随 L 的变化规律在 L 的不同区域差异较大: 当 $L > 2.0r_p$ 时, w 随 L 的增加而增大. 这是因为随着 L 的增加, 电

子的纵向受限减弱, 使得体系的能量 E 随高斯阱宽 L 的增加而减小, 而根据能量最低原理, 电子优先处于较低的能态; 在 L 取一定时, w 随阱深 V_0 的增加而减小, 这是因为随着 V_0 的增加, 电子的自陷加大, 致使体系的能量 E 随 V_0 的增加而增大所致. 当 $L < 2.0r_p$ 时, w 随 L 的减小而明显振荡变化, 这一结果与量子力学理论相吻合, 因为电子受限越强, 电子态的波动性越凸显.

图4描绘了概率密度 w 在不同介电常数比 η 下随高斯势不同阱宽 L 的变化. 由图4可以看出, 在 L 一定时, w 随 η 的增加而减小, 这是因为库仑

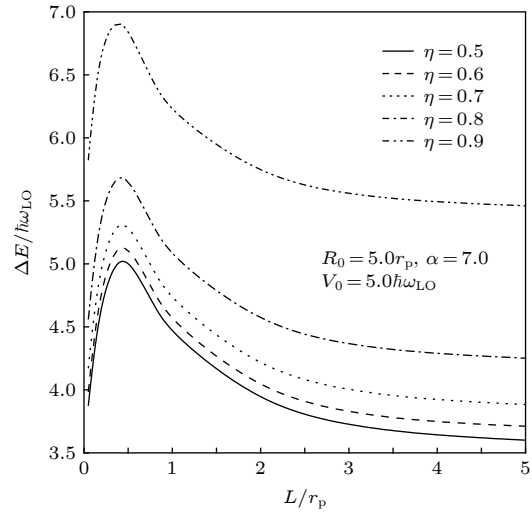


图2 能隙 ΔE 在不同介电常数比 η 下随高斯势阱宽 L 的变化

Fig. 2. Energy gap ΔE versus the well width L of the AG potential under different the dielectric constant (DC) ratio η .

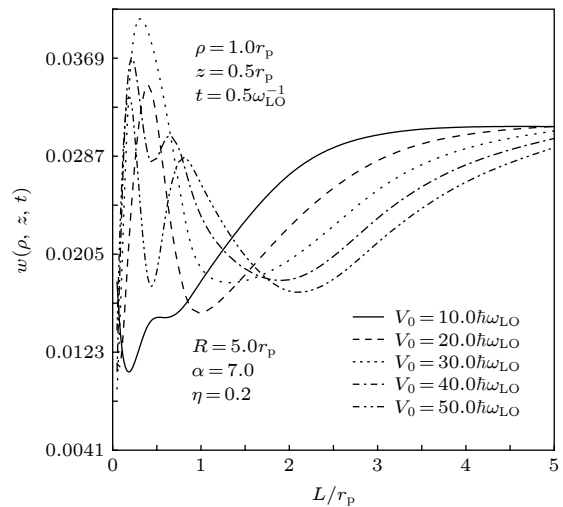


图3 概率密度 w 在高斯势不同阱深 V_0 下随阱宽 L 的变化

Fig. 3. Probability density w versus the well width L under different the well depth V_0 of the AG potential.

能 $2\alpha/(1-\eta)$ 随 η 的增加而增大, 进而推高体系的能量, 促使电子优先处于较低的能量态.

图 5 揭示了振动周期 T 在高斯势不同阱深 V_0 下随其阱宽 L 的变化. 由图 5 可以看出, T - L 曲线呈现两头高、中间低 (最小值出现在 $L \approx 0.3r_p$ 处)、左右非对称的显著特点. 这与图 1 恰好相反, 这是由于 $T \propto 1/\Delta E$. 这一最小值对于量子比特信息存储是不利的, 因此选择量子点的厚度应远大于 $L \approx 0.3r_p$. 在 L 一定时, T 随阱深 V_0 的增加而减小, 这是因为 ΔE 随着 V_0 的增加而增大. 这意味着

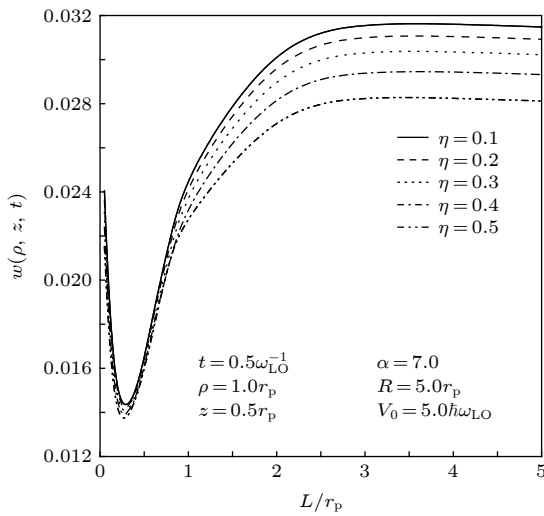


图 4 概率密度 w 在不同介电常数比 η 下随高斯势不同阱宽 L 的变化

Fig. 4. Probability density w as a function of the well width L of the AG potential at different the DC ratio η .

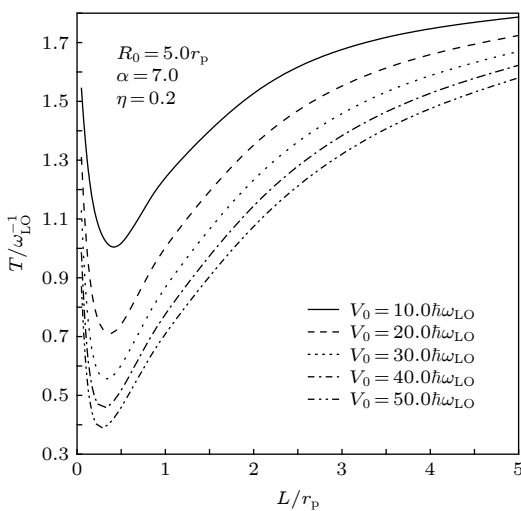


图 5 振动周期 T 在高斯势不同阱深 V_0 下随其阱宽 L 的变化

Fig. 5. Variations of oscillation period T as a function of the well width L at different well width L of the AG potential.

深阱量子点也不利于量子比特信息的存储.

图 6 描写了振动周期 T 在不同介电常数比 η 下随高斯势阱宽 L 的变化. 由图 6 可以看出, 当 L 一定时, T 随 η 的增加而减小, 这是因为 ΔE 随 η 的增加而增大. 这表明量子点中杂质的存在, 使得电子叠加态的振荡周期变小, 而振荡周期的变小, 意味着量子点存活时间变小. 这对于量子点量子比特的信息存储是不利的.

图 7 描绘了声子自发辐射率 τ^{-1} 在不同介电常数比 η 下随高斯势不同阱宽 L 的变化. 由图 7 可

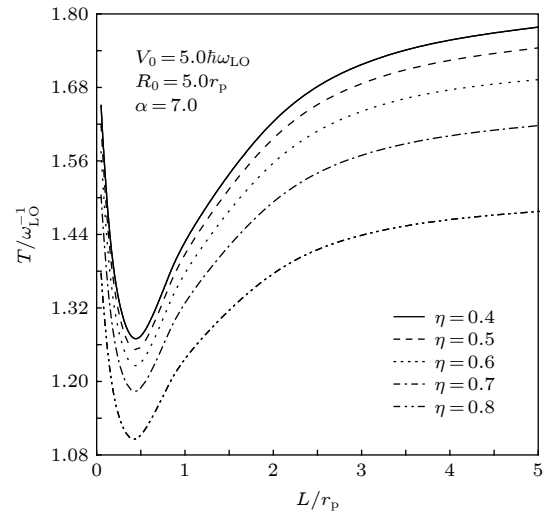


图 6 振动周期 T 在不同介电常数比 η 下随高斯势阱宽 L 的变化

Fig. 6. Variations of oscillation period T as a function of the well width L of the AG potential at different the DC ratio η .

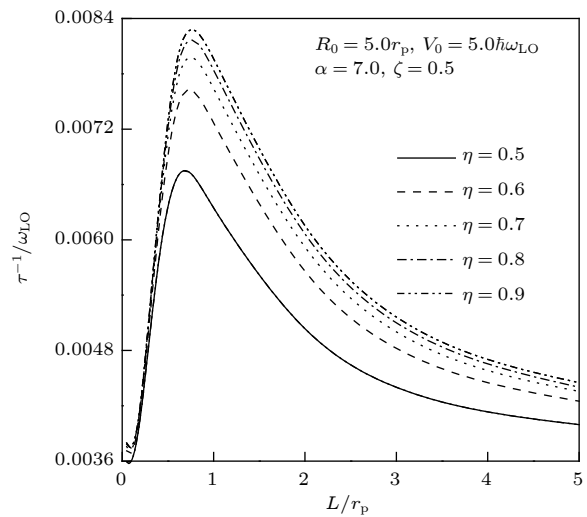


图 7 自发辐射率 τ^{-1} 在不同介电常数比 η 下随高斯势阱宽 L 的变化

Fig. 7. Spontaneous emission rate τ^{-1} as a function of the well width L of the AG potential at different the DC ratio η .

以看出, τ^{-1} - L 曲线呈现两头低、中间高、左右非对称形状. 由 (12) 式不难看出这是由于 ΔE - L 曲线的非对称高斯分布传导至 τ^{-1} - L 曲线所致. 自发辐射率 τ^{-1} 的最大值出现在 $L \approx 0.7r_p$ 处, 换言之, 在 $L \approx 0.7r_p$ 处退相干时间 τ 取最小值, 这对量子比特的信息存储是最不利的. 由图 7 还可以看出, τ^{-1} 随 η 的增加而减小, 这意味着退相干时间 τ 随 η 的增加而增大. 这表明量子点中杂质库仑势的存在对于量子点量子比特的信息存储是有利的.

图 8 表示了自发辐射率 τ^{-1} 在不同色散系数 ζ 下随高斯势阱宽 L 的变化. 由图 8 可以看出, τ^{-1} 随 ζ 的增加而减小, 这意味着退相干时间 τ 随 ζ 的增加而增大. 色散系数是由材料本身性质决定, 因此要想获得较长的退相干时间应选择色散系数较大的材料来制备量子点量子比特.

图 9 表示相位品质因子 Q 在不同介电常数比 η 下高斯势不同阱宽 L 的变化. 由图 9 可以看出, Q - L 曲线呈现“ γ ”形特点, 最小值出现在 $L \approx 0.8r_p$ 处. 由 (12) 和 (13) 式不难看出, 该曲线是一个被 ΔE 调节的 τ - L 曲线. 由图 9 还可以看出, Q 随 η 的增加而增大, 这表明杂质库仑势的存在有利于相位旋转操控. 图 10 描绘了相位品质因子 Q 在不同色散系数 ζ 下随高斯势不同阱宽 L 的变化. 由图 10 可以看出, Q 随 ζ 的增加而增大, 这意味着选择色散系数越大的材料制备量子点, 其量子比特球越容易实施相位旋转操控.

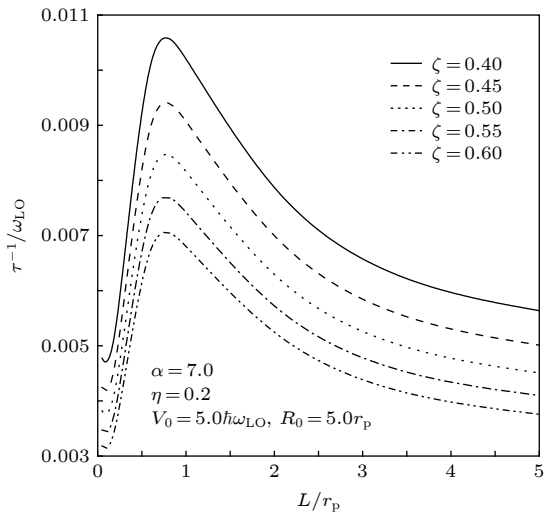


图 8 自发辐射率 τ^{-1} 在不同色散系数 ζ 下随高斯势阱宽 L 的变化

Fig. 8. Spontaneous emission rate τ^{-1} as a function of the well width L of the AG potential at different dispersion coefficient ζ .

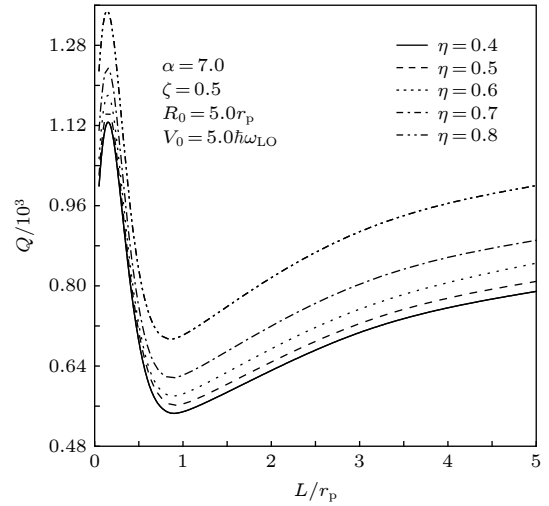


图 9 相位品质因子 Q 在不同介电常数比 η 下随高斯势阱宽 L 的变化

Fig. 9. Quality factors of phase rotation Q as a function of the well width L of the AG potential at different the DC ratio η .

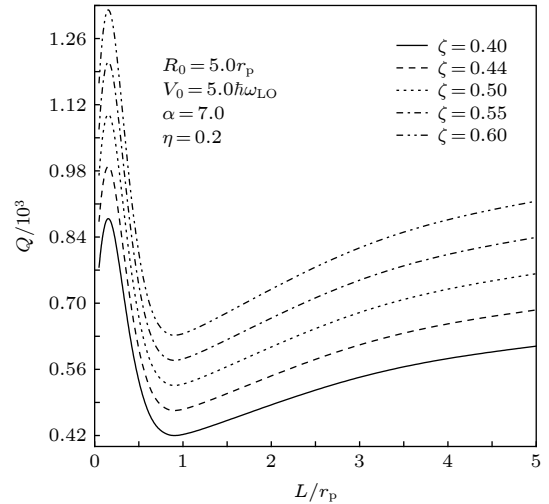


图 10 相位品质因子 Q 在不同色散系数 ζ 下随高斯势阱宽 L 的变化

Fig. 10. Quality factors of phase rotation Q as a function of the well width L of the AG potential at different dispersion coefficient ζ .

4 结 论

选用双参量非对称高斯势描写量子点中电子的受限能够更好地反映量子比特的量子化特性. 介质的色散系数、介电常数和电声耦合强度对量子比特的形成和信息存储有利有弊. 提高材料的色散系数或介电常数比不仅有利于量子比特球的相位旋转操控, 也有利于改善量子点量子比特的相干性. 本文的结果对从事制备和操控量子点量子比特的相关实验工作提供借鉴.

参考文献

- [1] Li S S, Long G L, Bai F S, Feng S L, Zheng H Z 2001 *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **98** 11847
- [2] Zhang X, Li H O, Wang K, Cao G, Xiao X, Guo G P 2018 *Chin. Phys. B* **27** 020305
- [3] Tang J, Xu X L 2018 *Chin. Phys. B* **27** 027804
- [4] Wang K, Li H O, Xiao M, Cao G, Guo G P 2018 *Chin. Phys. B* **27** 090308
- [5] Xiao W, Xiao J L 2016 *Int. J. Theor. Phys.* **55** 2936
- [6] Chen Y J, Xiao J L 2017 *J. Low Temp. Phys.* **186** 241
- [7] Sun Y, Ding Z H, Xiao J L 2017 *J. Electron. Mater.* **46** 439
- [8] Wang X Q, Xiao J L 2017 *Iran. J. Sci. Technol. Trans. Sci.* **41** 273
- [9] Khordad R, Goudarzi S, Bahramiyan H 2016 *Indian J. Phys.* **90** 659
- [10] Xie W F 2003 *Solid State Commun.* **127** 401
- [11] Gu J, Liang J J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5335 (in Chinese) [谷娟, 梁九卿 2005 物理学报 **54** 5335]
- [12] Xiao W, Qi B, Xiao J L 2015 *J. Low Temp. Phys.* **179** 166
- [13] Xiao J L 2016 *Int. J. Theor. Phys.* **55** 147
- [14] Wuyunqimuge, Xin W, Wang G S, Eerdunchaolu 2018 *J. Low Temp. Phys.* **193** 48
- [15] Bai X F, Zhao Y W, Xin W, Yin H W, Eerdunchaolu 2019 *Opt. Quant. Electron.* **51** 114
- [16] Lee T D, Low F M, Pines D 1953 *Phys. Rev.* **90** 297
- [17] Pekar S I, Deigen M F 1948 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **18** 481
- [18] Landau L D, Lifshitz E M 1987 *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory* (London: Pergamen) p532
- [19] Sun Y, Ding Z H, Xiao J L 2014 *J. Low Temp. Phys.* **177** 151
- [20] Liang Z H, Cai C Y, Xiao J L 2019 *Int. J. Theor. Phys.* **58** 2320

Influence of dispersion and impurity on double-parameter asymmetric Gaussian quantum dot qubit*

Wuyunqimuge¹⁾ Han Chao^{2)†} Eerdunchaolu²⁾

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

2) (*Institute of Condensed Matter Physics, Hebei Normal University of Science and Technology, Qinhuangdao 066004, China*)

(Received 20 June 2019; revised manuscript received 4 October 2019)

Abstract

Selecting the double-parameter asymmetric Gaussian (AG) potential to describe the confinement effect of electrons in a quantum dot, the ground state and the first excited state energy eigenvalues and eigenfunctions of the three-body interaction system that are composed of the electrons, the impurity and the longitudinal optical phonon are derived by using the Lee-Low-Pines unitary transformation and the Pekar-type variational method, and the two-level structure required for a qubit is constructed. The influences of material parameters such as the dispersion coefficient, dielectric constant (DC) ratio, and electron-phonon coupling (EPC) constant on the probability density and the oscillation period of electron in the AG potential qubit are investigated. Based on the Fermi gold rule and the even-order approximation, the effects of the DC ratio, the dispersion coefficient and the EPC constant on the qubit decoherence are studied. And then the influences of the dispersion coefficient, the DC ratio and the EPC constant on the phase rotation manipulation of the qubit sphere are discussed. Numerical results show that the dispersion coefficient, the DC ratio and EPC constant of the medium have both advantages and disadvantages for the formation and information storage of qubits. The probability density of electrons in quantum dot qubits decreases with DC ratio increasing and exhibits significant oscillations as the well width of the AG potential decreases; the oscillation period of the qubit decreases with the well depth of the AG potential or the DC ratio increasing; the decoherence time increases with DC ratio or dispersion coefficient increasing; the phase rotation quality factor increases with DC ratio or dispersion coefficient increasing. Using the double-parameter AG potential to describe the confinement of electrons in quantum dot will better reflect the quantization properties of qubit. Increasing the dispersion coefficient or the DC ratio of the material is beneficial to not only the phase rotation manipulation of the qubit sphere, but also improving the coherence of the quantum dot qubit. The results of this paper can be used for reference in the experimental work on the constructing and manipulating of the quantum dot qubits.

Keywords: qubit, asymmetric Gaussian potential, probability density, oscillation period, decoherence time, phase rotation quality factor

PACS: 78.67.Hc, 71.38.Fp, 63.20.kd

DOI: 10.7498/aps.68.20190960

* Supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51902085) and the Nature Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant No. 2019MS01011).

† Corresponding author. E-mail: hc_206@126.com