



Wrocław University of Technology

**Symulacje dynamiki kwantowej
ładunków i spinów w nanostrukturach**

Paweł Machnikowski

Piotr Kaczmarkiewicz, Łukasz Marcinowski

Instytut Fizyki PWr.



Plan

Kwantowa symulacja stochastyczna:

Podwójna kropka kwantowa

sprzężona z kwantowym stykiem punktowym;

Obliczenia “strukturalne”:

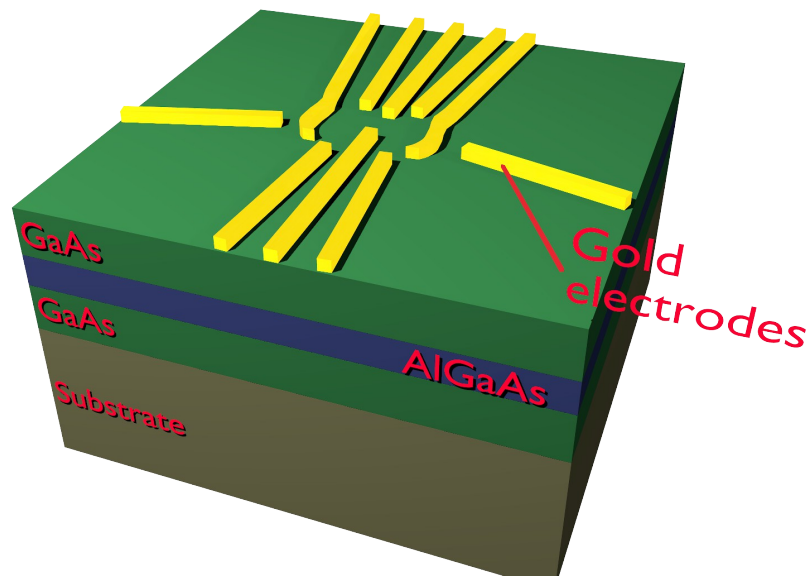
Skorelowane stany elektronowe i dziurowe w kresce kwantowej,

oddziaływanie kulombowskie,

elementy macierzowe na przejścia fononowe;

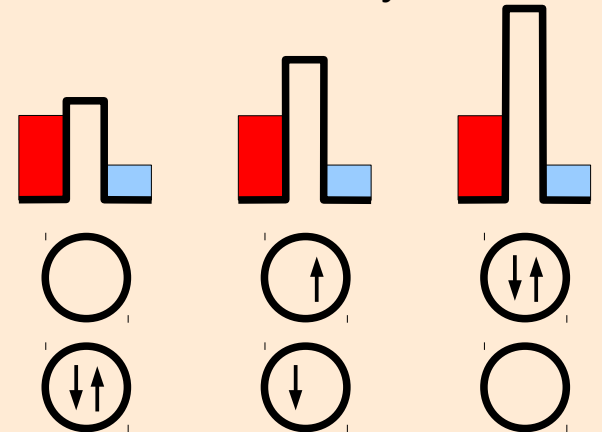
Symulacja relaksacji ładunków w kresce kwantowej (równanie Lindblada).

Kwantowy styk punktowy



E ↑

Zmiana bariery w KSP



- Podwójna kropka kwantowa (DQD) sprzężona z kwantowym stykiem punktowym
- Elektrony z DQD zmieniają wysokość bariery KSP
- Wykorzystanie KSP jako urządzenia mierzącego stan DQD [1]
- Oddziaływanie elektronów z fononami w KSP może uniemożliwić pomiar.

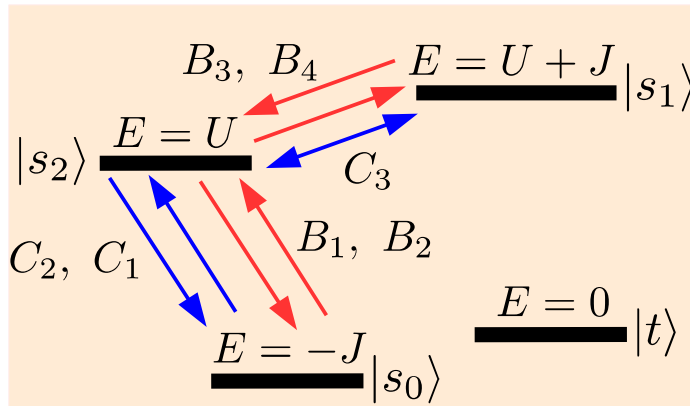
[1] A. C. Johnson et.al., Nature, Vol. 435 925 (2005)

[2] S.D Barrett, T. M. Stace, PRB **73** 075324 (2006)



Układ

Kwantowe Równanie Fundamentalne



$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_{\text{DQD}}, \rho] + \frac{1}{\hbar^2} \sum_i^3 \frac{1}{2} (C_i^\dagger C_i \rho + \rho C_i^\dagger C_i) + \frac{1}{\hbar^2} \sum_i^3 C_i \rho C_i^\dagger + \frac{1}{\hbar^2} \sum_i^4 \frac{1}{2} (B_i^\dagger B_i \rho + \rho B_i^\dagger B_i) + \frac{1}{\hbar^2} \sum_i^4 B_i \rho B_i^\dagger$$

$$\rho(t + dt) = \rho(t) - \frac{i}{\hbar} [\tilde{H}, \rho(t)]_* dt + \sum_i C_i \rho C_i^\dagger dt$$

Singlet: przejścia nieelastyczne

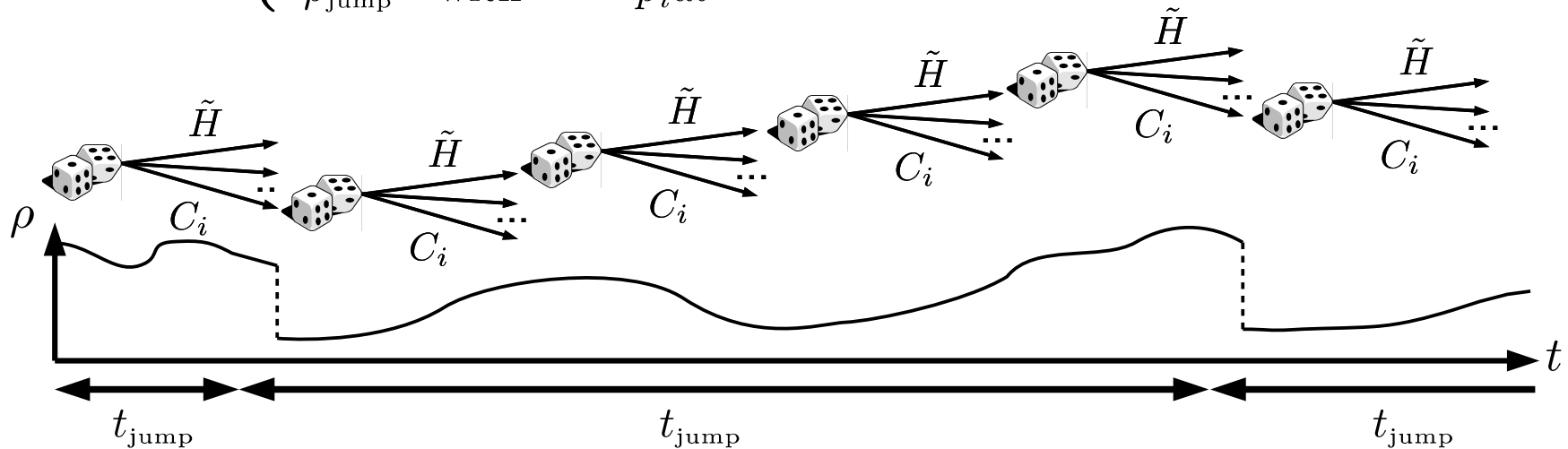
Tryplet: zakaz Pauliego

Singlet i tryplet: przejścia kwazielastyczne

Przejścia fononowe

Metoda skoków kwantowych

$$\rho(t + dt) = \begin{cases} \rho_{\text{con}} & \text{with } 1 - \sum_i p_i dt \\ \rho_{\text{jump}}^{(i)} & \text{with } p_i dt \end{cases}$$



- obliczenie czasu ewolucji ciągłej $F(t) = P(T \leq t) = 1 - \text{Tr } \tilde{\rho}_{\text{con}}$
- obliczenia Monte-Carlo \rightarrow wymaganych $\sim 10^6$ przebiegów MC,
- czas pojedynczego przebiegu 1-2min
 \rightarrow czas symulacji na komputerze biurowym ~ 130 dni (8 rdzeni)



Wyniki

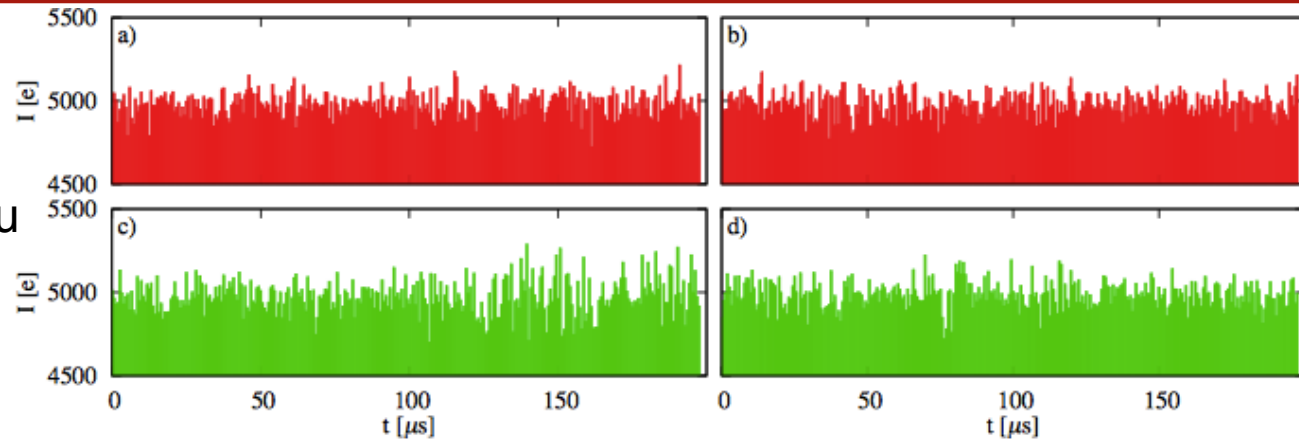
Skoki kwantowe



Tunelowanie elektronu przez KSP



Sygnal prądowy

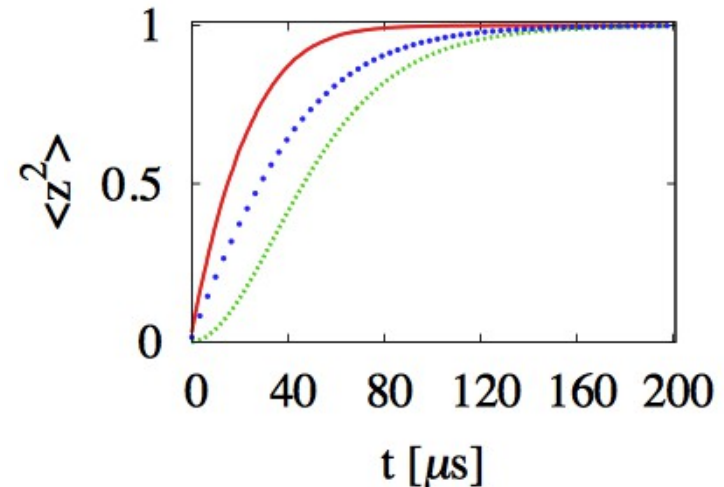


— triplet — singlet

$$|\Psi(0)\rangle = (|T\rangle + |S\rangle)/\sqrt{2}$$

“Kolaps wektora stanu”

$$z = 1 - 2\langle T|\rho|T\rangle$$

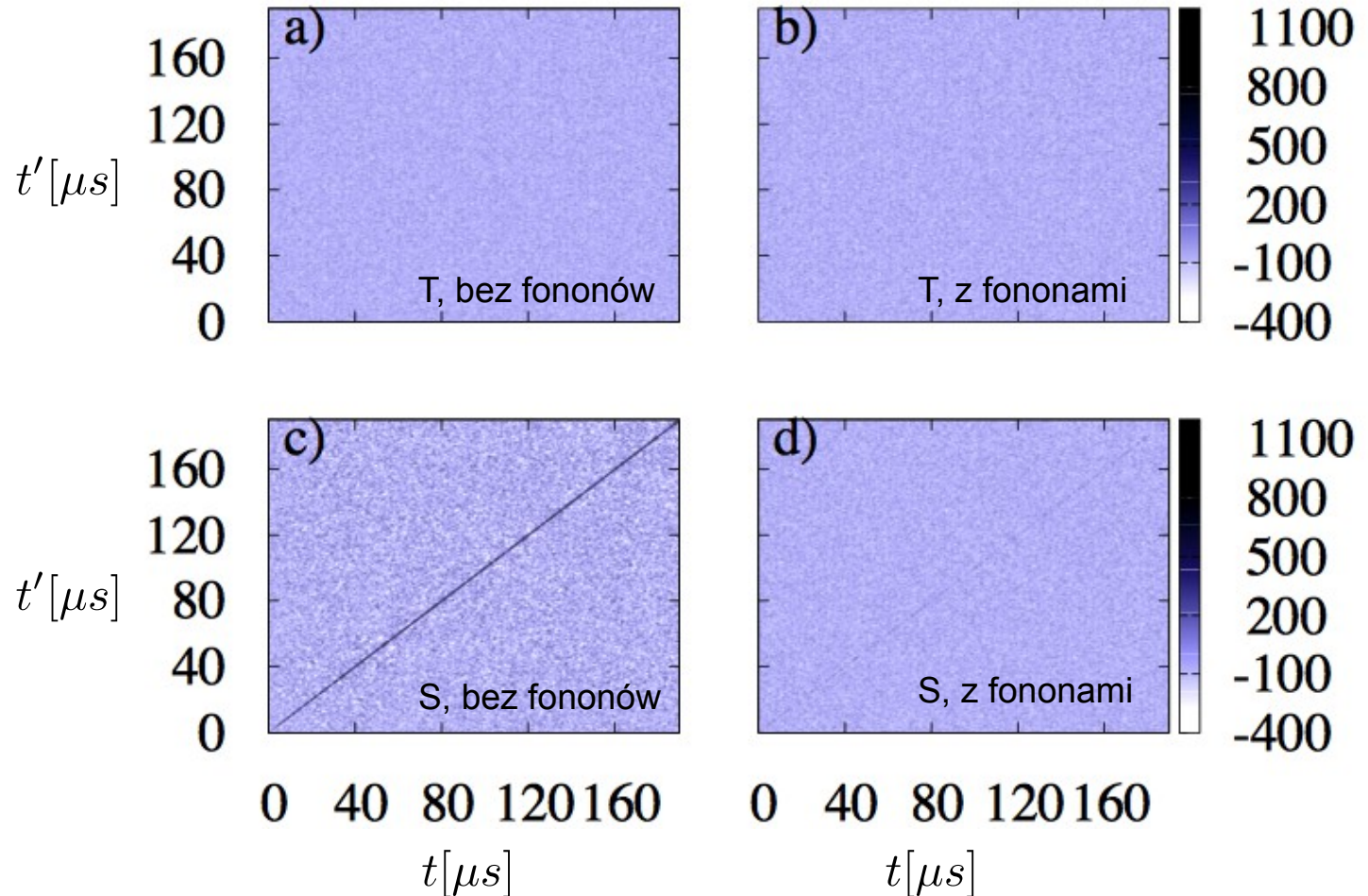




Wyniki

Funkcja korelacji:

$$G(t, t') = \langle I(t')I(t) \rangle - \langle I(t') \rangle \langle I(t) \rangle$$



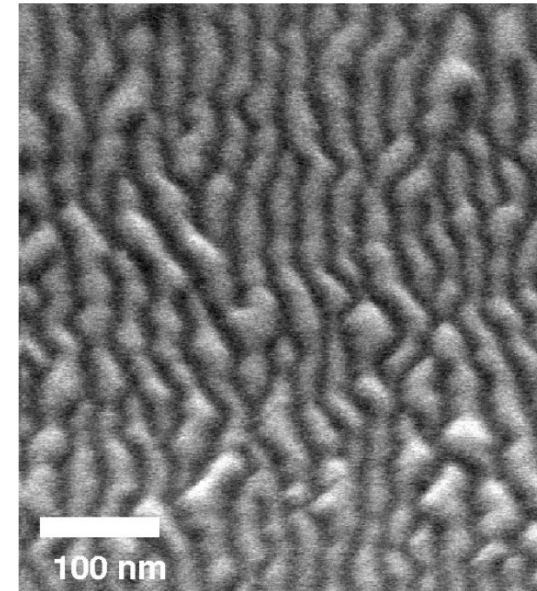
Kreski kwantowe

Kreski kwantowe - charakterystyka struktury

- Silna anizotropia
- Obecność fluktuacji kształtu
- Zastosowania w optoelektronice
(wzmacniacze optyczne, lasery pracujące w trzecim oknie telekomunikacyjnym)

Kreski kwantowe - zagadnienie numeryczne

- Silna zależność właściwości optycznych od szczegółów geometrii struktury (wielowymiarowa przestrzeń parametrów)
- Konieczność uruchomienia wielu niezależnych instancji programu
- Krótki czas obliczeń pojedynczej instancji (<50h)



J. P. Reithmaier et al.
Proc. IEEE 95, 1779 (2007)



Kreski kwantowe - obliczenia numeryczne

◆ Etapy obliczeń:

obliczenie elementów macierzowych oddziaływania kulombowskiego (całkowanie w 3 wymiarach i transformaty Fouriera)

diagonalizacja macierzy

wyznaczenie elementów macierzowych przejść niepromienistych (ponownie całkowanie)

◆ Wykorzystywane oprogramowanie:

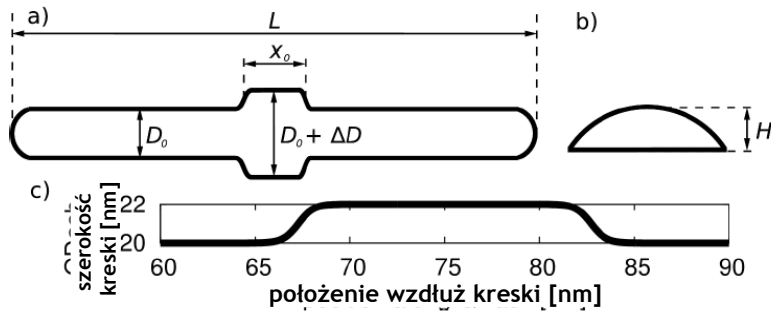
Procedury numeryczne, m.in. Lapack, GSL

◆ Wielkość obliczeń:

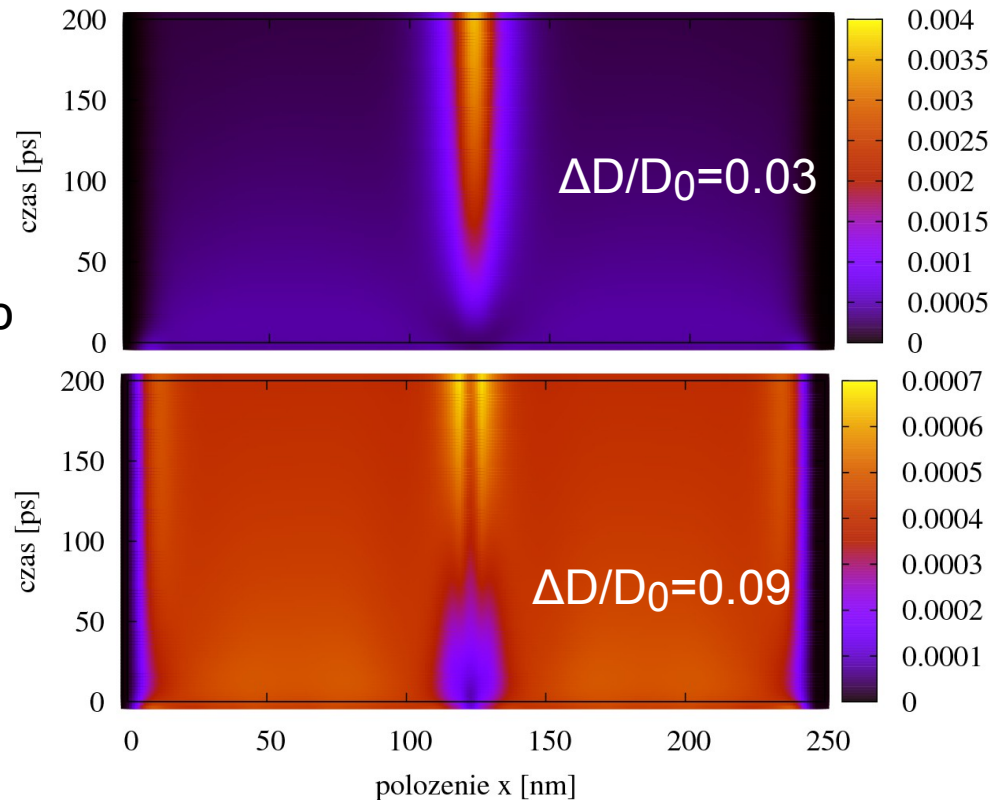
około 50h (na 4-rdzeniowym procesorze) na każdą strukturę, obliczenia trzeba powtórzyć dla wielu zestawów parametrów.

Kreski kwantowe - identyfikacja wąskich gardeł w relaksacji fononowej

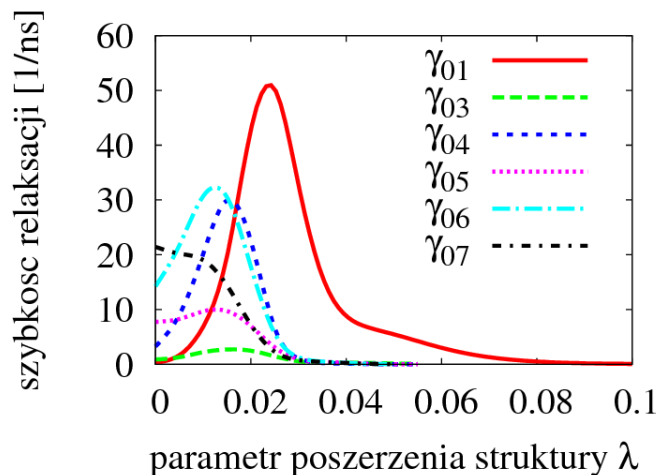
Schematyczny model kreski kwantowej



Mapy gęstości prawdopodobieństwa dziur w funkcji czasu



Relaksacja do stanu podstawowego





Podsumowanie

Przeprowadzono symulacje stochastyczne kwantowej dynamiki ładunków w podwójnej kropce kwantowej sprzężonej z kwantowym stykiem punktowym – wpływ fononów na przebieg pomiaru kwantowego.

Obliczono stany elektronowe, dziurowe i ekscytonowe w kresce kwantowej oraz szybkości przejść fononowych pomiędzy nimi oraz zasymulowano dynamikę relaksacji ładunków.