量子点环嵌入 Aharonov-Bohm 干涉器中电子的退耦合态及反共振现象*

吴丽君[1)2)]　韩　宇[1)†]　公卫江[3)]　谭天亚[1)]

1)(辽宁大学物理学院,沈阳　110036)

2)(沈阳理工大学理学院,沈阳　110159)

3)(东北大学理学院,沈阳　110004)

(2010 年 4 月 19 日收到;2011 年 1 月 14 日收到修改稿)

采用 Anderson 模型哈密顿量和非平衡态格林函数方法对量子点环以不同构型嵌入 A-B 干涉器中电子输运的退耦合态及反共振现象进行了理论研究. 结果表明,量子点环 A-B 干涉器的结构对称性以及穿过 A-B 干涉器的磁通量是诱发退耦合现象的两种物理机理. 耦合量子点结构的对称性越高,体系在相干电子输运过程中表现出来的退耦合及反共振现象越明显. 而且在具有高度对称性的耦合量子点结构中,通过磁场调节体系的结构参数可以分别使第奇数或第偶数分子本征态从电极上退耦合,从而使电子输运电导表现出奇偶对等振荡现象. 这为设计纳米电子开关器件提供了一个新的物理模型.

关键词: 量子点环, A-B 干涉器, 退耦合, 反共振

PACS: 73.23.-b, 73.63.-b

1. 引　　言

近几年,电子在量子点系统中的输运在理论上及实验上一直被广泛地研究,电子的相干输运性质是未来纳米电子器件设计及研制的理论基础[1—4]. 量子点具有类似于原子的特性,如分立的电子能级、强电子关联效应等,已经被实验上所观察到的库仑阻塞效应[5,6]、电导振荡[7]和 Kondo 效应[8—11]等所证实. 一个单量子点通常被称为人造原子,而耦合的多个量子点系统可被看作是一个量子点分子. 随着纳米技术的发展,织构各种形状的耦合量子点结构已经成为可能,构造耦合量子点链和量子点环已经在实验中得到实现[12]. 耦合量子点体系具有比单量子点更大的自由度,体系中的电子相干性质更为丰富,如 Fano 效应[13]以及可调节的退耦合态和新反共振点[14]. 因此,越来越多的实验研究都关注耦合量子点体系的电子输运性质. 嵌入 A-B 干涉器的平行耦合双量子点体系[15—18]及 T 形耦合双量子点体系[19,20]的电子输运性质已经被广泛研究. 此类耦合双量子点体系中电子的隧穿耦合总是产生一个弱耦合电子态和一个强耦合电子态,它为量子点的电子输运提供了强弱两个通道. 在能够反映电子隧穿输运的线性电导谱中,共振峰是由电子通过两通道之间的"相长"干涉引起的. 其中 Fano 共振峰发生在体系 Fermi 能级与弱耦合电子态能级一致时,而 Breit-Wigner 共振峰发生在体系 Fermi 能级与强耦合电子态能级一致时. 并且耦合量子点的分子态与电极之间的耦合强度可以得到适当控制,而产生可调节的 Fano 共振[12,19]. 在耦合量子点 A-B 干涉器中,A-B 效应将使体系的电子相干输运性质更为丰富. 通过适当地调节穿过 A-B 环的磁通量,可以使耦合量子点的一些分子本征态完全从电极上退耦合,导致线性电导谱中所对应的共振峰消失,从而形成了所谓的 BIC(band state in continuum)现象[20—22]. 退耦合态的出现在量子点的量子相干输运中起到重要作用,特别是它改变了电子输运的量子相干特征[23]. 同时,在电子输运线性电导谱中出现的电导零点是源自电子通过不同路径之间的完全"相消"干涉,被称为反共振点. 这一现象已在

* 国家自然科学基金(批准号: 10904010,10932002)和辽宁省教育厅项目(批准号:2009A309)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: hanyu@lnu.edu.cn

实验中被观察到，成为理论研究的热点之一[24,25]，其在器件上的应用更被广泛研究[26,27].

我们已经研究了以不同构型嵌入 A-B 干涉器的量子点链的电子输运性质[28,29]. 研究中发现，其电子输运性质强烈地依赖于量子点阵列的几何结构以及其与电极的耦合方式. 这些依赖于结构参数的电导性质具有潜在的器件应用价值. 寻找理想的耦合量子点 A-B 干涉器结构，可为纳米电子开关器件的设计提供新的思路. 本文中，我们研究了具有 N 个量子点的量子点环嵌入 A-B 干涉器中电子的相干输运性质. 我们采用 Anderson 模型哈密顿量和非平衡态格林函数方法对 N 量子点环以不同构型嵌入 A-B 干涉器中电子输运的退耦合态及反共振现象进行了理论研究. 为了简化问题，我们忽略了量子点内和量子点间的库仑相互作用. 研究发现，耦合量子点体系的电子输运的退耦合态及反共振现象由量子点耦合体系的结构(包括量子点的几何结构和嵌入 A-B 干涉器的方式)和体系的结构参数两种物理机理决定. 在具有对称性的结构中，电子输运过程中表现出来的退耦合及反共振现象十分明显，而且通过磁场调节体系的结构参数可以使奇(偶)分子态分别从电极上退耦合，从而使电子输运电导表现出奇偶对等振荡现象. 而在非对称结构中，体系也会表现出退耦合及反共振现象，但却没有表现出奇偶对等振荡现象. 此外，我们还利用分子轨道理论分析了退耦合态及反共振产生的物理机理.

2. 理论模型和计算方法

2.1. Hamiltonian

我们所研究的模型是由 N 个量子点构成的量子点环(N 量子点环)嵌入 A-B 干涉器中的介观结构如图 1(a) 所示. 为简化表述，我们把 N 量子点环的这种以量子点 1 和量子点 q 嵌入 A-B 干涉器的方式(量子点与电极耦合方式)定义为 $(1, q)$，$q \in [2, N]$. 描述体系电子运动的 Hamiltonian 可由 Anderson 模型表示为

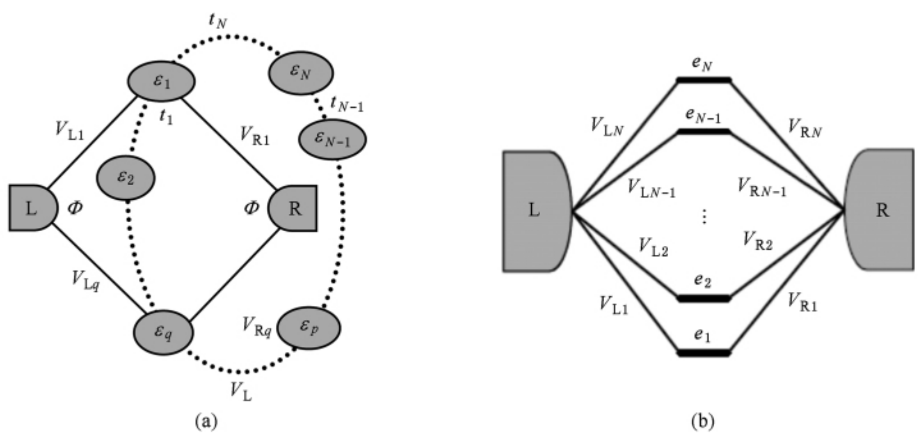

图 1 (a) 量子点环嵌入 A-B 干涉器的结构示意图，施加于系统的磁通 Φ 穿过 A-B 环的两个子环且平行于量子点环所在平面；(b) 量子点环的分子态与电极耦合示意图

$$H = H_C + H_D + H_T, \tag{1}$$

其中第一项表示电极中无相互作用电子(巡游电子)的 Hamiltonian，可写为

$$H_C = \sum_{k\alpha \in L,R} \varepsilon_{\alpha k} C_{\alpha k}^{\dagger} C_{\alpha k}, \tag{2}$$

式中 $C_{\alpha k}^{\dagger}$($C_{\alpha k}$) 分别表示巡游电子在电极 α 的态 $|k\rangle$ 上的产生(湮没)算符；$\varepsilon_{\alpha k}$ 表示相应态上的单电子能量. (1) 式中的第二项描述耦合量子点分子中的局域态电子，其 Hamiltonian 可写为

$$H_D = \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j d_j^{\dagger} d_j + \left(t_N d_N^{\dagger} d_1 + \sum_{j=1}^{N-1} t_j d_j^{\dagger} d_{j+1} + \text{h.c.} \right), \tag{3}$$

式中的 $d_j^{\dagger}$(d_j) 是第 j 个量子点上电子的产生(湮没)算符，ε_j 代表相应量子点中的电子能级. t_j 表示量子点间的耦合系数(hopping coefficient). h. c. 表示括号中前两项的复共轭项. 为了简化问题的复杂性，在这里我们假设所有的量子点属性都相同，并且每一个量子点上只有一个相关的能级，即每个量子点

能级都取 $\varepsilon_j = \varepsilon_0$. (1) 式中的最后一项代表量子点与电极之间的电子隧穿,可写为

$$H_{\mathrm{T}} = \sum_{k\alpha \in \mathrm{L,R}} (V_{\alpha 1} d_1^{\dagger} C_{\alpha k} + V_{\alpha q} d_q^{\dagger} C_{\alpha k}) + \mathrm{h.c.} \quad (4)$$

式中 $V_{\alpha 1}$ 和 $V_{\alpha q}$ 分别表示 A-B 干涉器两个臂上的两个量子点(量子点 1 和量子点 q)与两电极间的耦合系数. 由于磁场的作用,耦合系数可以表示为 $V_{\mathrm{L}1} = V\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_{\mathrm{L}}/2}$, $V_{\mathrm{L}q} = V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_{\mathrm{L}}/2}$, $V_{\mathrm{R}1} = V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_{\mathrm{R}}/2}$ 和 $V_{\mathrm{R}q} = V\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_{\mathrm{R}}/2}$, 式中 V 表示量子点与电极间的耦合系数. 当有一磁通量穿过 A-B 干涉器的两个子环且平行于 N 量子点环所在平面时,由磁通量引起的电子波的相移 ϕ_α 与磁通量 Φ_α 之间的关系为 $\phi_\alpha = 2\pi\Phi_\alpha/\Phi_0$, 其中 $\Phi_0 = h/e$ 表示磁通量子. (4) 式中 h.c. 表示前两项的复共轭项.

2.2. 线性电导

为了研究体系中电子的输运性质,有必要计算体系的线性电导. 由 Landauer-Büttiker 公式可得到体系在零偏压和零温极限下的线性电导的表达式

$$G = \frac{2e^2}{h} T(\varepsilon) \big|_{\varepsilon = \varepsilon_{\mathrm{F}}}, \quad (5)$$

式中 $T(\varepsilon)$ 表示该体系的隧穿函数,借助格林函数,可以表示为[24,30]

$$T(\varepsilon) = \mathrm{Tr}\,[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}} G^{\mathrm{r}}(\varepsilon) \boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{R}} G^{\mathrm{a}}(\varepsilon)], \quad (6)$$

式中 $\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}$ 是一个 $N \times N$ 阶矩阵,定义为 $[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}]_{jj'} = 2\pi V_{\mathrm{L}j} V^*_{\mathrm{L}j'} \rho_{\mathrm{L}}(\varepsilon)$ $(j, j' = [1, N])$, 它描述 A-B 干涉器两个臂上的量子点与左电极 L 的耦合强度[14,22]. $V_{\mathrm{L}j}$, $V_{\mathrm{L}j'}$ 仅当 $j = 1, j' = q$ 时为有限值. $\rho_{\mathrm{L}}(\varepsilon)$ 表示电极 L 中电子的态密度,可写为 $\rho_{\mathrm{L}}(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathrm{L}k})$, 它通常可以被看作是一个常数,即可以近似把 $[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}]_{jj'}$ 看成不随电子能量 ε 变化的常数. 同理,我们也可以定义量子点与右电极 R 的耦合强度 $[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{R}}]_{jj'}$. 于是矩阵 $[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}]$ 和 $[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{R}}]$ 可写为

$$[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{L}} & \cdots & 0 & \cdots & \sqrt{\boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{L}}\boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{L}}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_{\mathrm{L}}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \iddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & & 0 & & 0 & & 0 \\ \vdots & & \iddots & & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{\boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{L}}\boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{L}}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_{\mathrm{L}}} & \cdots & 0 & \cdots & \boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{L}} & & 0 \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$[\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{R}}] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{R}} & \cdots & 0 & \cdots & \sqrt{\boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{R}}\boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{R}}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_{\mathrm{R}}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \iddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & & 0 & & 0 & & 0 \\ \vdots & & \iddots & & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{\boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{R}}\boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{R}}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_{\mathrm{R}}} & \cdots & 0 & \cdots & \boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{R}} & & 0 \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad (8)$$

考虑量子点与电极之间对称的隧穿耦合,可以取 $\boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{L}} = \boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{L}} = \boldsymbol{\Gamma}_1^{\mathrm{R}} = \boldsymbol{\Gamma}_q^{\mathrm{R}} = \boldsymbol{\Gamma}$. (6) 式中 $G^{\mathrm{r}}_{jj'}(\varepsilon)$ 和 $G^{\mathrm{a}}_{jj'}(\varepsilon)$ 分别为 Fourier 空间的延迟格林函数和超前格林函数,其定义如下:

$$G^r_{jj'}(t) = -\mathrm{i}\theta(t) \langle\{d_j(t), d^{\dagger}_{j'}\}\rangle, \quad (9)$$

$$G^a_{jj'}(t) = \mathrm{i}\theta(-t) \langle\{d_j(t), d^{\dagger}_{j'}\}\rangle, \quad (10)$$

式中, $\theta(x)$ 是阶跃函数. 格林函数的 Fourier 变换遵从关系式

$$G^{\mathrm{r(a)}}(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} G^{\mathrm{r(a)}}_{jj'}(t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon t}\mathrm{d}t, \quad (11)$$

延迟和超前格林函数可以通过格林函数的运动方程来求解[31,32]. 超前格林函数由 $G^{\mathrm{a}}(\varepsilon) = [G^{\mathrm{r}}(\varepsilon)]^{\dagger}$ 给出. 延迟格林函数的矩阵形式为

$$G^{\mathrm{r}}(\varepsilon) = \{[g^{\mathrm{r}}(\varepsilon)]^{-1} - \Sigma^{\mathrm{r}}_{\mathrm{T}}(\varepsilon)\}^{-1}, \quad (12)$$

其中 $g^{\mathrm{r}}(\varepsilon)$ 表示未与电极耦合的量子点环的延迟格林函数,可写为

$$[g^{\mathrm{r}}(\varepsilon)]^{-1} = \begin{bmatrix} \varepsilon - \varepsilon_1 + \mathrm{i}0^+ & -t_1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & -t_N^* \\ -t_1^* & \varepsilon - \varepsilon_2 + \mathrm{i}0^+ & -t_2 & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & -t_2^* & \varepsilon - \varepsilon_3 + \mathrm{i}0^+ & -t_3 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & -t_3^* & \varepsilon - \varepsilon_4 + \mathrm{i}0^+ & -t_4 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & -t_{N-1} \\ -t_N & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -t_{N-1}^* & \varepsilon - \varepsilon_N + \mathrm{i}0^+ \end{bmatrix}. \quad (13)$$

(12)式中 $\Sigma_{\mathrm{T}}^{\mathrm{r}}(\varepsilon)$ 表示延迟自能矩阵,是由量子点与电极隧穿耦合产生的,在宽带近似下可写为

$$\Sigma_{\mathrm{T}}^{\mathrm{r}}(\varepsilon) = -\frac{\mathrm{i}}{2}(\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}} + \boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{R}}). \tag{14}$$

可见,由(5)—(14)式便可得到耦合量子点体系在零温下的线性电导 G. 通过调整左右电极的门压使 Fermi 能级 ε_{F} 在量子点能级 ε_j 附近扫描,可得到线性电导 G 随 ε_{F} 的变化曲线.

2.3. 分子轨道表象

由 N 个量子点耦合的 N 量子点环,可看作一个"量子点分子",其中的每个量子点被看作是一个"量子点原子". 由于不考虑电子的相互作用,耦合量子点体系的线性电导谱反映了耦合量子点分子的本征能量谱. 当量子点分子的一个本征能级与体系 Fermi 能级一致时,电导谱出现一个共振峰. 为了解读数值计算得到的电导谱,我们将量子点环耦合体系转化到分子轨道表象,如图 1(b)所示. 其分子轨道表象中系统的 Hamiltonian 可写为

$$H = \sum_{k\alpha\in \mathrm{L,R}} \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k}^{\dagger} c_{\alpha k} + \sum_{m=1} e_m f_m^{\dagger} f_m + \sum_{\alpha k} \nu_{\alpha m} f_m^{\dagger} c_{\alpha k} + \mathrm{h.c.}, \tag{15}$$

分子本征能量为[23]

$$e_m = \varepsilon_0 + 2t_0 \cos\left(\frac{2m\pi}{N}\right) \quad (m = 1, 2, \cdots, N), \tag{16}$$

其原子表象和分子表象满足如下的转换关系:

$$[f^{\dagger}] = [\eta][d^{\dagger}], \tag{17}$$

(17)式中,$f^{\dagger}(f)$ 为分子轨道表象的电子产生(湮没)算符; $[\eta]$ 为 $N\times N$ 的表象转换矩阵,可写为

$$[\eta] = \sqrt{\frac{1}{N}}\begin{bmatrix} \exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{N}\right) & \exp\left(\mathrm{i}\frac{4\pi}{N}\right) & \cdots & \exp\left(\mathrm{i}\frac{2N\pi}{N}\right) \\ \exp\left(\mathrm{i}\frac{4\pi}{N}\right) & \exp\left(\mathrm{i}\frac{8\pi}{N}\right) & \cdots & \exp\left(\mathrm{i}\frac{4N\pi}{N}\right) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \exp\left(\mathrm{i}\frac{2N\pi}{N}\right) & \exp\left(\mathrm{i}\frac{4N\pi}{N}\right) & \cdots & \exp\left(\mathrm{i}\frac{2N^2\pi}{N}\right) \end{bmatrix}. \tag{18}$$

(15)式中,$\nu_{\alpha m}$ 表示量子点分子的本征态 $|m\rangle$ 与电极 α 上的态 $|k\rangle$ 之间的耦合系数,可写为

$$\nu_{\alpha m} = V([\eta]_{1m}^{\dagger} + [\eta]_{qm}^{\dagger} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_\alpha}), \tag{19}$$

定义 $\gamma_{mm}^{\alpha} = 2\pi \nu_{\alpha m} \nu_{\alpha m}^{*} \rho_\alpha(\varepsilon)$,表示分子本征态 $|m\rangle$ 和电极 α 上的 $|k\rangle$ 态之间的耦合强度,可写为

$$\gamma_{mm}^{\alpha} = \boldsymbol{\Gamma} |[\eta]_{1m}^{\dagger} + [\eta]_{qm}^{\dagger} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_\alpha}|^2. \tag{20}$$

将(18),(19)式代入(20)式可得

$$\gamma_{mm}^{\alpha} = \frac{\boldsymbol{\Gamma}}{N}\left|\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2m\pi}{N}\right) \times \left[1 + \exp\left(-\mathrm{i}\frac{2m(q-1)\pi}{N}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_\alpha}\right]\right|^2. \tag{21}$$

(20)式表示了分子轨道表象中量子点分子本征能级与电极的耦合. 若耦合强度 $\gamma_{mm}^{\alpha} \neq 0$,则在耦合量子点体系的线性电导谱中 $\varepsilon_{\mathrm{F}} = e_m$ 处会出现一个共振峰,γ_{mm}^{α} 的大小反映了共振峰的线宽. 若 $\gamma_{mm}^{\alpha} = 0$,则反映了量子点分子本征态 $|m\rangle$ 从电极 α 上退耦合,反映在线性电导谱中,则为 $\varepsilon_{\mathrm{F}} = e_m$ 处的一个共振峰消失.

3. 数值结果与分析

根据 Landauer-Büttiker 公式所给出的线性电导表达式,我们从数值上计算了 N 量子点环以不同方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱,即给出耦合体系的线性电导随入射电子能量的变化关系. 为了便于计算,引入一个参数 t_0 作为能量单位,并且取量子点间耦合强度 $t_j = \Gamma = t_0$,量子点处于基态 $\varepsilon_j = \varepsilon_0 = 0$,通过调整左右电极的门压,使 ε_{F} 在 $\varepsilon_j = \varepsilon_0 = 0$ 附近扫描.

图 2 和图 3 中分别给出了 N 为偶数时的量子点环以 $(1, 1+N/2)$ 方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱. 这种结构具有高度的对称性,即与电极耦合的两量子点之间具有相同数目的量子点,是完全对称结构. 图 2 中量子点 1 和量子点 q 之间的量子点数目为奇数,而图 3 中为偶数.

如图 2(a)为 4 量子点环以(1,3)方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱. 在无磁通的情况下(即 $\phi = 0$),电导谱中出现了两个共振峰,分别对应于耦合量子点体系的分子本征能级 $e_2 = -2$ 和 $e_4 = 2$,相应的分子本征态为 $|2\rangle$ 和 $|4\rangle$(序数为偶数). 谱中的电导零点,即反共振点,位于单量子点能级 $\varepsilon_0 = 0$ 处,且对应于简并的分子本征能级 $e_1 = e_3 = 0$,可见分子本征态 $|1\rangle$ 和 $|3\rangle$(序数为奇数)从电极上退耦合. 当调节磁通相因子到 $\phi = \pi$ 时,在原来的反共振点 $\varepsilon_0 = 0$ 处却出现了一个 Breit-Wigner 峰,而分子本征态 $|2\rangle$ 和 $|4\rangle$ 从电极上退耦合. 可见,磁通的适当调节,使从电极上退耦合的分子本征态 $|m\rangle$ 的奇偶性发生改变,电导谱表现出奇偶对等振荡现

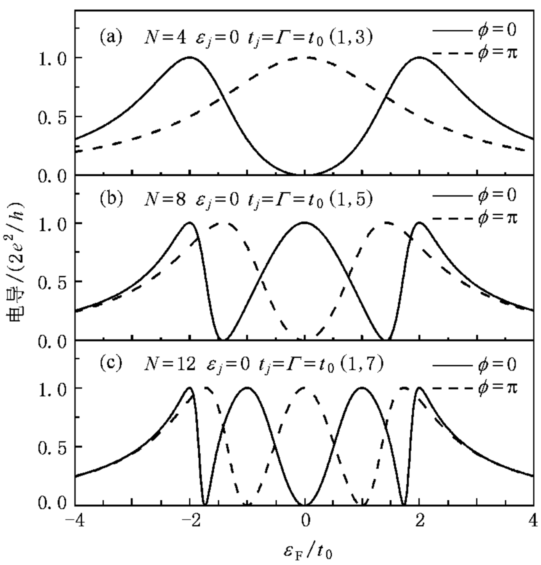

图 2　N 量子点环以 (1,1 + N/2) 方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱(耦合参数取 t_j = Γ = t_0,t_0 为能量单元)　(a) N = 4,构型(1,3) ; (b) N = 8,构型(1,5) ; (c) N = 12,构型(1,7)

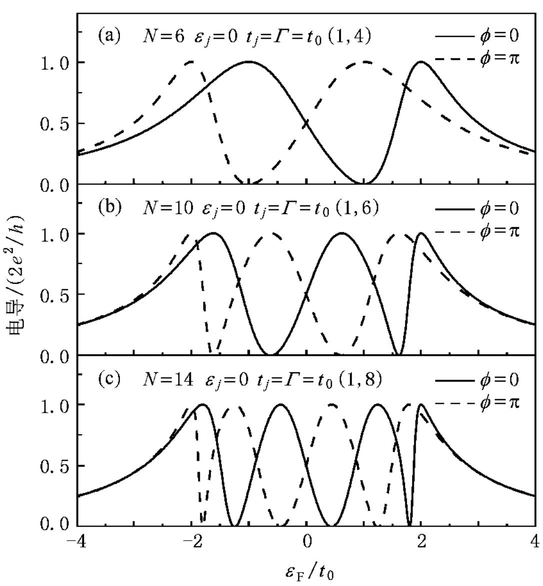

图 3　N 量子点环以 (1,1 + N/2) 方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱(耦合参数取 t_j = Γ = t_0,t_0 为能量单元)　(a) N = 6,构型(1,4) ; (b) N = 10,构型(1,6) ; (c) N = 14,构型(1,8)

象[33]. 图 2(b) 给出了 8 量子点环以(1,5) 方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱. 图中表现出与图 2(a) 中类似的对等振荡现象. 在无磁通的情况下,电导谱中出现了三个共振峰,其中 Fano 峰分别对应于耦合量子点体系的分子本征能级 $e_4 = -2$ 和 $e_8 = 2$,相应的分子本征态为 $|4\rangle$ 和 $|8\rangle$,而 Breit-Wigner 峰位于单量子点能级 $\varepsilon_0 = 0$ 处,对应于简并的分子本征能级 $e_2 = e_6 = 0$ 及分子本征态 $|2\rangle$ 和 $|6\rangle$,所有峰均对应于序数为偶数的分子本征态. 同时,电导谱中出现了两个反共振点,分别位于简并能级 $e_1 = e_7 = \sqrt{2}$ 和 $e_3 = e_5 = -\sqrt{2}$ 处,可见,所有序数为奇数的分子本征态从电极上退耦合. 当调节磁通使 $\phi = \pi$ 时,情况相反,原来反共振点的位置出现了两个共振峰,单量子点能级 $\varepsilon_0 = 0$ 处的 Breit-Wigner 峰变为反共振点,所有序数为偶数的分子本征态从电极上退耦合. 可见,通过磁通的适当调节,图 2(b) 中出现了与图 2(a) 中相同的奇偶对等振荡现象. 由(16) 式可以看出,N 量子点环耦合体系应该有 N 个分子本征态,在线性电导谱中应该对应 N 个共振峰,而图 2 所给出的共振峰的数目明显少于 N 个,这说明体系的对称性引发了丰富的退耦合现象. 下面从分子轨道表象来解释上述退耦合现象的物理机理: 由(16) 式可以推出 $e_m = e_{N-m}$,即分子本征态 $|m\rangle$ 和 $|N-m\rangle$ 为简并态,简并的分子本征态和电极 α 的耦合可以写作

$$H_{\alpha\mathrm{T}}(m) = W_{\alpha m}\sum_k \left\{\exp\left[-\mathrm{i}\frac{2\pi m}{N}q\right]f_m^{\dagger}c_{\alpha k} + \exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi m}{N}q\right]f_{N-m}^{\dagger}c_{\alpha k}\right\} + \mathrm{h.c.}\quad(22)$$

式中 $W_{\alpha m} = \frac{V_{\alpha q}}{\sqrt{N}} + \frac{V_{\alpha q+1}}{\sqrt{N}}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{2\pi m}{N}\right]$. 通过上式,可以很容易地发现,两个电极都同时与这两个简并的分子态耦合. 但是,如果定义两个正交态

$$|\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp\left[-\mathrm{i}\frac{2\pi m}{N}q\right]|m\rangle + \exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi m}{N}q\right]|N-m\rangle\right),\quad(23)$$

和

$$|\beta'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp\left[-\mathrm{i}\frac{2\pi m}{N}q\right]|m\rangle - \exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi m}{N}q\right]|N-m\rangle\right),\quad(24)$$

然后用 $|\beta\rangle$ 和 $|\beta'\rangle$ 来替换 $|m\rangle$ 和 $|N-m\rangle$ 这两个简并的分子态,可得 Hamiltonian $H_{\alpha\mathrm{T}}(m)$ 的新表达式

$$H_{\alpha\mathrm{T}}(m) = \sqrt{2}W_{\alpha m}\sum_k f_{\beta}^{\dagger}c_{k\alpha} + \mathrm{h.c.},\quad(25)$$

结果发现,仅仅有态 $|\beta\rangle$ 与电极 α 耦合,而另一个简并态 $|\beta'\rangle$ 完全从电极上退耦合,所以本征能级的简并引起了量子点环中退耦合现象的出现. 又由(21) 式,当 $q-1 = N/2$ 时,可以得出

$$\gamma_{mm}^{\alpha} = \frac{\Gamma}{N}\left|\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2m\pi}{N}\right)\left[1+\exp(-\mathrm{i}m\pi)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_\alpha}\right]\right|^2. \tag{26}$$

由(26)式可以看出:当 $\phi=0$, m 为奇数时, $\gamma_{mm}^{\alpha}=0$;而当 $\phi=\pi$, m 为偶数时, $\gamma_{mm}^{\alpha}=0$. 可见,量子点环耦合体系以完全对称方式嵌入 A-B 干涉器时,无磁通情况下,第奇数个分子本征态从电极上退耦合;通过调节磁通,使 $\phi=\pi$,第偶数个分子本征态从电极上退耦合. 因此,磁通的调节,使从电极上退耦合的分子本征态 $|m\rangle$ 的奇偶性发生改变,从而在电导谱中表现出奇偶对等振荡现象. 上述分析表明:引发耦合量子点体系电子输运的退耦合现象有两种物理机理,其一是体系结构的对称性而引起的分子本征态的简并;其二是磁通的调节使体系结构参数发生变化,使分子态与电极的耦合系数为零. 通过上面的分析,可以很好地解释图 2(c) 中给出的 $N=12$ 的线性电导谱所表现出来的奇偶对等振荡现象.

图 3 中给出了 N 分别为 6,10,14 以完全对称方式 $(1, 1+N/2)$ 嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱,可以看到和图 2 中相似的奇偶对等振荡现象. 根据分子轨道理论均可给出合理地解释. 如图 3(a) 所示, 6 量子点环以(1,4)方式嵌入 A-B 干涉器,在无磁通的情况下(即 $\phi=0$),电导谱中出现了两个的 Fano 峰,分别位于耦合量子点体系的分子本征能级 $e_2=e_4=-1$ 和 $e_6=2$ 处,对应的分子本征态为 $|2\rangle$, $|4\rangle$ 和 $|6\rangle$(第偶数个分子本征态),其中分子本征态 $|2\rangle$ 和 $|4\rangle$ 为简并态,所以只表现为一个 Fano 峰. 由(26)式可知,简并的分子本征态 $|1\rangle$ 和 $|5\rangle$ 及非简并态 $|3\rangle$(第奇数个分子本征态)从电极上退耦合. 反共振点出现在 $e_1=e_5=1$ 处. 通过适当调整磁通,当 $\phi=\pi$ 时, Fano 峰位于耦合量子点体系的分子本征能级 $e_1=e_5=1$ 和 $e_3=-2$ 处,对应的分子本征态为 $|1\rangle$, $|3\rangle$ 和 $|5\rangle$(第奇数个分子本征态). 而简并的分子本征态 $|2\rangle$ 和 $|4\rangle$ 及非简并态 $|6\rangle$(第偶数个分子本征态)从电极上退耦合,反共振点出现在 $e_2=e_4=-1$ 处. 可见,通过磁通的适当调节,线性电导谱表现出奇偶对等振荡现象.

比较图 2 和图 3 中的线性电导谱,可见均出现了相似的奇偶对等振荡现象. 我们可以通过调节磁通量来控制电子输运的导通(共振)与阻断(反共振)状态. 因此,量子点环以完全对称的方式 $(1, 1+N/2)$ 嵌入 A-B 干涉器的结构为制造纳米电子开关器件提供了一种新的可能模型. 从对图 2 与图 3 的对比中发现,图 2 所显示的电导谱在体系的 Fermi 能级与单量子点能级 $\varepsilon_0=0$ 一致时发生了奇偶对等振荡现象. 这是由于在图 2 所示的几种构型中单量子点能级恰好与一个分子本征能级一致而产生的. 可见,若调节门电压使电极的 Fermi 能级与单量子点能级一致,通过磁通量可以控制器件的导通状态.

为了研究对称性结构对退耦合现象的影响,图 4 中给出了 6 量子点环以所有可能方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱. 其中图 4(a) 的嵌入方式具有一定的对称性,而图 4(b) 为非对称结构,图 4(c) 为已分析过的完全对称结构. 我们已经知道,由于 6 量子点环的分子本征能级的简并,引起了两个分子本征态从电极上退耦合,应该有四个不同的分子本征能级,表现出四个共振峰. 当 $\phi=0$ 时,图 4(a) 出现三个共振峰,分子本征态 $|3\rangle$ $(e_3=-2)$ 从电极上退耦合;图 4(b) 没有退耦合现象发生,在单量子点能级处出现反共振点. 当调节磁通为 $\phi=\pi$ 时,图 4(a) 中分子本征态 $|6\rangle$ $(e_6=2)$ 从电极上退耦合,分子本征态 $|3\rangle$ $(e_3=-2)$ 发生共振,其余的共振峰位置没改变,线宽发生变化;在图 4(b) 中分子本征态 $|3\rangle$ $(e_3=-2)$ 和 $|6\rangle$ $(e_6=2)$ 从电极上退耦合,其余的共振峰位置没变,线宽发生变化,单量子点能级处亦出现反共振点. 可见,当量子点能级与

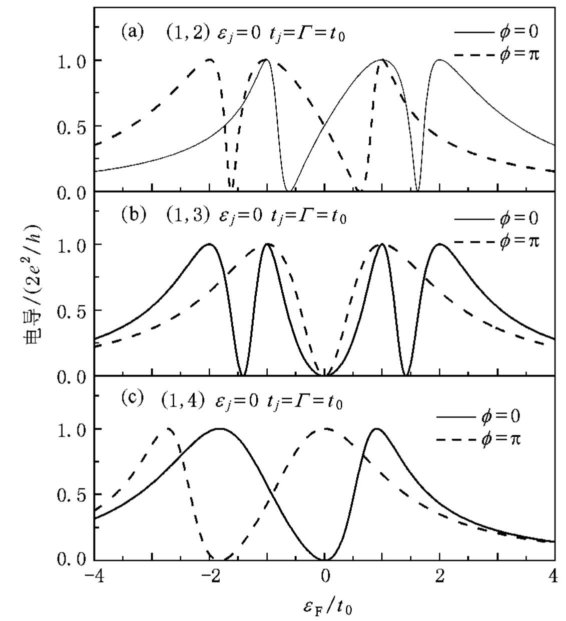

图 4 6 量子点环以 $(1, q)$ 方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱(耦合参数取 $t_j=\Gamma=t_0$, t_0 为能量单元) (a) $q=2$; (b) $q=3$; (c) $q=4$

Fermi 能级一致时,电导将总是达到零点,这一特性不受磁通的影响. 可见,相较于对称结构,在非对称结构中,退耦合态的产生仅由分子本征能级的简并引起,退耦合现象明显减少,且不会出现奇偶对等振荡现象.

为了进一步阐明上述观点,图 5 中给出了 7 量子点环(N 为奇数)以所有可能方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱,均为非对称构型. 其分子本征能级的简并,引起了三个分子本征态从电极上退耦合,应该有四个不同的分子本征能级,表现出四个共振峰. 当 $\phi = 0$ 时,图 5(a),(b) 和(c) 均出现四个共振峰对应于四个不同的分子本征能级. 这说明,无论以何种方式嵌入 A-B 干涉器,由于均无对称性而没有退耦合现象发生. 调节磁通,当 $\varphi = \pi$ 时,可以发现图 5(a),(b) 和(c) 均只有分子本征态 $|7\rangle$($e_7 = -2$) 发生了退耦合现象,其余的共振峰只是线宽发生变化. 由(21) 式,当 $m = N$ 且 $\phi = \pi$ 时,$\gamma^{\alpha}_{NN} = \frac{\Gamma}{N}|(1 + e^{i\phi_\alpha})|^2 = 0$,可见分子本征态 $|7\rangle$ 从电极上退耦合.

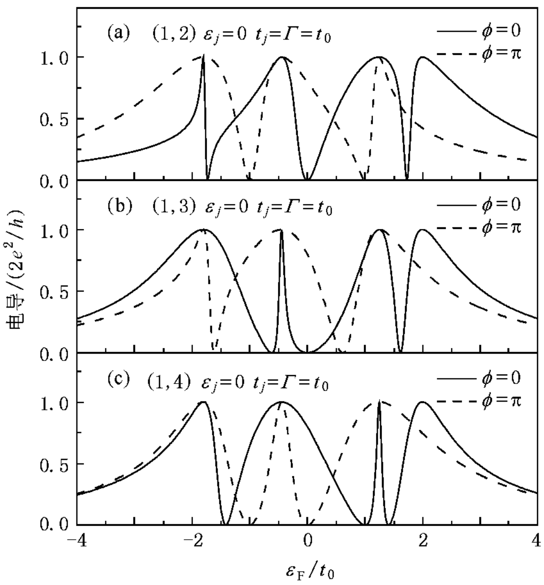

图5 7 量子点环以(1,q) 方式嵌入 A-B 干涉器的线性电导谱(耦合参数取 $t_j = \Gamma = t_0$, t_0 为能量单元) (a) $q = 2$; (b) $q = 3$; (c) $q = 4$

4. 结 论

本文采用 Anderson 模型哈密顿量和非平衡态格林函数方法对 N 量子点环以不同构型嵌入 A-B 干涉器中电子输运的退耦合态及反共振现象进行了理论研究. 结果表明,耦合量子点结构的对称性和磁通的变化是引发退耦合现象的两种物理机理. 耦合量子点结构的对称性越高,体系在电子输运过程中表现出来的退耦合越明显. 首先在具有完全对称的耦合量子点结构中,退耦合现象最为明显,共振峰和反共振点出现的位置分别与奇偶分子本征态的能级相对应. 通过磁场调节体系的结构参数使奇偶分子本征态分别从电极上退耦合,可以使反共振点与共振峰之间互为转变,从而使电子输运电导表现出奇偶对等振荡现象. 这为设计纳米电子开关器件提供了一个新的可能模型. 其次,在非完全对称结构中,随着对称性的降低,退耦合现象明显减少,反共振点不再对应分子本征能级. 不同的嵌入方式,仅导致了共振峰的线宽和反共振点出现的位置不同. 磁通的调节亦不会引发奇偶对等振荡现象. 随着纳米技术的发展,量子点环的织构已经成为可能,因此本文研究的结果对于了解量子点环的电子输运性质及其在纳米电子器件上的应用会有所帮助.

[1] Lovett B W, Reina J H, Nazir A, Briggs G A 2003 *Phys. Rev.* B **68** 205319
[2] Zytic I, Fabian J, Sarma S D 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 323
[3] Xue H B, Zhang H Y, Nie Y H, Li Z J, Liang J Q 2010 *Chin. Phys.* B **19** 047303
[4] Wu S Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4175 (in Chinese) [吴绍全 2009 物理学报 **58** 4175]
[5] Scott-Thomas J H F, Field S B, Kastner M A, Smith H I, Antoriadis D A 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 583
[6] Zhang Y, DiCarlo L, McClure D T, Yamamoto M, Tarucha S, Marcus C M, Hanson M P, Gossard A C 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 036603
[7] Kouwenhoven L P, Vaar N C van der, Johnson A T, Kool W, Harmans C J P M, Williamson J G, Staing A A M, Foxon C T Z 1991 *Phys.* B **85** 367
[8] Cronenwett S M, Oosterkamp T H, Kouwenhoven L 1998 *Science* **281** 540
[9] Heary R J, Han J E, Zhu L 2008 *Phys. Rev.* B **77** 115132

[10] Wu S Q, He Z, Yan C H, Chen X W, Sun W L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1413 (in Chinese) [吴绍全、何 忠、阎从华、谌雄文、孙威立 2006 物理学报 **55** 1413]

[11] Wu S Q, Sun W L, Yu W L, Wang S J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2910 (in Chinese) [吴绍全、孙威立、余万伦、王顺金 2005 物理学报 **54** 2910]

[12] Sigrist M, Ihn T, Ensslin K, Reinwald M, Wegscheider W 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 036805

[13] Fano U., 1961 *Phys. Rev.* **124** 1866

[14] Yin Y Q, Li H, Ma J N, He Z L, Wang X Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4162 (in Chinese) [尹永琦、李 华、马佳宁、贺泽龙、王选章 2009 物理学报 **58** 4162]

[15] Lu H, LÄu R, Zhu B F 2005 *Phys. Rev.* B **71** 235320

[16] Sun Q F, Wang J, Gou H 2005 *Phys. Rev.* B **71** 165310

[17] Wu S Q, Hou T, Zhao G P, Li Z J, Yu W L 2010 *Chin. Phys.* B **19** 047202

[18] Chen X W, He D J, Wu S Q, Song K H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4287 (in Chinese) [谌雄文、贺达江、吴绍全、宋克慧 2006 物理学报 **55** 4287]

[19] Chen X W, Chen B J, Shi Z G, Song K H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2720 (in Chinese) [谌雄文、谌宝菊、施振刚、宋克慧 2009 物理学报 **58** 2720]

[20] Voo K-K, Chu C S 2006 *Phys. Rev.* B **74** 155306

[21] Ordonez G, Na K, Kim S 2006 *Phys. Rev.* A **73** 022113

[22] Wang X R, Wang Y, Sun Z Z 2002 *Phys. Rev.* B **65** 193402

[23] Bao K, Zheng Y S 2005 *Phys. Rev.* B **73** 045306

[24] Orellana P A, Domínguez-Adame F, Góez I, Ladrón M L, Guevara de 2003 *Phys. Rev.* B **67** 085321

[25] Santors L F, Dykman M I 2003 *Phys. Rev.* B **68** 214410

[26] Wu M W, Zhou J, Shi Q W 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1012

[27] Shi Q W, Zhou J, Wu M W 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 2547

[28] Han Y, Gong W J, Wu H N, Wei G Z 2009 *Phys.* B **404** 2001

[29] Gong W J, Han Y, Wei G Z 2009 *J. Phys.* **21** 175801

[30] Kubala B, KÄongin J 2002 *Phys. Rev.* B **65** 245301

[31] Seidl S, Kroner M, Dalgarno P A, Smith J M, Ediger M, Gerardot B D, Garcia J M, Petroff P M, Karrai K, Warburton R J 2005 *Phys. Rev.* B **72** 195339

[32] Warburton R J, Durr C S, Karrai K, Kotthaus J P, Medeiros-Ribeiro G, Petroff P M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 5282

[33] Tae-Suk K, Hershfield S 2002 *Phys. Rev.* B **65** 214526

Decoupled states and anti-resonance in the Aharonov-Bohm interferometer with embodied quantum-dot ring*

Wu Li-Jun[1)2)] Han Yu[1)†] Gong Wei-Jiang[3)] Tan Tian-Ya[1)]

1) (*Department of Physics, Liaoning University, Shenyang* 110036, *China*)

2) (*School of science, Shenyang Ligong University, Shenyang* 110159, *China*)

3) (*College of Sciences, Northeastern University, Shenyang* 110004, *China*)

(Received 19 April 2010; revised manuscript received 14 January 2011)

Abstract

Using the Anderson model Hamiltonian and the non-equilibrium Green's function method, the decoupled states and antiresonance presenting in the electronic transport through N-quantum-dot ring embodied in A-B interferometer are studied theoretically. We find that the symmetry of the coupled-dot system and the magnetic flux through the Aharonov-Bohm (A-B) interferometer are two physical mechanisms responsible for the decoupled states. Even-odd parity oscillations occur in linear conductance spectra of such a highly symmetric quantum dot ring, due to even or odd molecular state decoupling from the leads by tuning the structure parameters, i. e., the magnetic flux. The results provide a new model for the designing of the nano-device.

Keywords: quantum-dot ring, A-B interferometer, decoupled state, anti-resonance

PACS: 73.23.-b, 73.63.-b

---

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10904010, 10932002), and the Foundation Research Plan of Liaoning educational Bureau (Grant No. 2009A309).

† Corresponding author. E-mail: hanyu@lnu.edu.cn