

# 量子点分布误差对镜像电荷自动元胞机的影响

汪艳贞 吴南健

(中国科学院半导体研究所, 北京 100083)

摘要: 研究了量子点分布的误差对镜像电荷量子元胞自动机(QCA)的影响. 镜像电荷 QCA 每个元胞中的四个量子点是被严格限制在正方形元胞的四个角上的, 考虑到现有的量子点生长技术, 量子点偏离理想位置的情况是不可避免的. 模拟了在正态分布误差存在时镜像电荷 QCA 的工作情况, 并估算了在较小的介电常数下镜像电荷 QCA 可能达到的最高工作温度. 仿真结果表明正态分布标准差  $\sigma$  小于 0.1 时, 镜像电荷 QCA 可以正常工作, 同时缩小 QCA 的元胞尺寸可以使镜像电荷 QCA 的最高工作温度达到室温以上.

关键词: QCA; 镜像电荷; 量子点; 自动元胞机

EEACC: 2560B

中图分类号: TN43 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2005)S0-0261-04

## 1 引言

在过去的几十年中, 微电子集成电路的集成度越来越高, 随着其特征线宽的不断缩小, 晶体管的特性接近其物理极限, 量子效应也更加显著, 这使集成电路的发展遇到一个不可逾越的瓶颈. 为了克服以上问题并利用量子力学效应开发新的器件和电路, Lent 提出了一种新的计算模式——量子元胞自动机<sup>[1]</sup>(quantum cellular automaton, QCA)的概念. 量子自动元胞机利用了元胞之间近距离相互作用来实现信息传输和逻辑运算, 它可以避免大规模集成电路中长距离布线困难的问题, 同时具有低功耗、高集成度等特点. 近些年, QCA 的研究已得到越来越多的关注, 很多具体的实现方案被提出来, 并且小规模 QCA 在实验上得到了验证. 其中, 镜像电荷效应 QCA<sup>[2]</sup>是最具可实现性的方案之一.

但是, 很多对 QCA 的研究是在理想模型下进行的, 而在实际的运用中必须考虑一些不可避免的误差因素. 本文对运用镜像电荷效应的 QCA 器件做了进一步的研究, 主要考察了当量子点偏离理想位置时 QCA 器件的工作状态及元胞的尺寸大小对 QCA 器件工作温度的影响.

## 2 镜像电荷 QCA 模型及模拟方法

### 2.1 镜像电荷 QCA 模型

镜像电荷 QCA 的基本电路结构如图 1 所示. 量子自动元胞机电路设计在金属衬底上, 在元胞电路和金属衬底之间设有氧化膜. 每个元胞都包含有四个量子点和两个剩余电子, 当电子注入量子点时, 在金属衬底上形成镜像电荷以保持整个电路的电荷中性. 注入的电子能在同一个元胞的不同量子点间隧穿, 也能在不同的元胞间相互隧穿. 图 2 是每个元

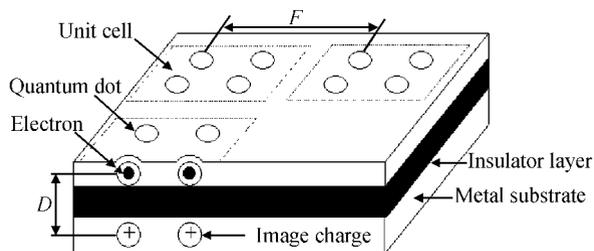


图 1 镜像电荷 QCA 电路图

Fig. 1 Schematic structure of image-charge QCA circuit

胞的两个可能的极化态,极化系数  $P$  定义为  $P = \frac{(\rho_2 + \rho_4) - (\rho_1 + \rho_3)}{\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \rho_4}$ ,  $\rho_i$  是在第  $i$  个量子点中的电子密度. 极化状态的“1”和“-1”能用于标记二进制的“1”和“0”.  $L$  是元胞的大小,  $D$  是剩余电荷和镜像电荷之间的距离,  $F$  是相邻元胞之间的距离,  $d$  是量子点的尺寸大小.

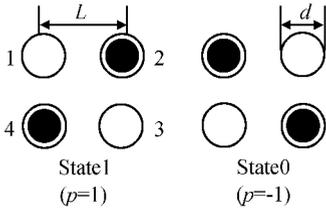


图 2 元胞的两个不同极化态

Fig. 2 Unit cell and two states of polarization

### 2.2 模拟方法

我们是采用扩展的 Hubbard-type 哈密顿模型<sup>[2]</sup>来表示镜像电荷 QCA 的哈密顿:

$$H = \sum_{m,i,\sigma} E_0 n_{mi\sigma} + \sum_{m,i \neq j,\sigma} t_{mi,mj} C_{mi\sigma}^+ C_{mj\sigma} + \sum_{m \neq k,i,j,\sigma} t_{mi,mk} C_{mi\sigma}^+ C_{kj\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{m,i,\sigma} U_{mj,mi} n_{mi\sigma} n_{mi-\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{m,i \neq j,\sigma,\sigma'} U_{mi,mj} n_{mi\sigma} n_{mj\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{m \neq k,i,j,\sigma,\sigma'} U_{mi,kj} n_{mi\sigma} n_{kj\sigma'}$$

其中  $E_0$  是单个电子位于量子点中的基准能量,可设为 0;  $t_{mi,mk}$  是位于第  $m$  个元胞中的第  $i$  个电子与第  $k$  个元胞中的第  $j$  个电子之间的隧穿系数;  $C_{mi\sigma}^+$  ( $C_{mi\sigma}$ ) 是第  $m$  个元胞的第  $i$  个自旋为  $\sigma$  的电子的产生(消灭)算符;  $n_{mi\sigma}$  是第  $m$  个元胞的第  $i$  个自旋为  $\sigma$  的电子的数密度算符;  $U_{mi,mk}$  是位于第  $m$  个元胞的第  $i$  个量子点的电子和位于第  $k$  个元胞的第  $j$  个量子点的电子之间的库仑势能:

$$U_{mi,kj} = \frac{2q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \times \left[ \frac{1}{|R_{mi} - R_{kj}|} - \frac{1}{\sqrt{(|R_{mi} - R_{kj}|)^2 + D^2}} \right]$$

其中  $q$  是电子的电荷量;  $\epsilon_r$  是电子所在介质的介电常数,  $R_{mi}$  表示第  $m$  个元胞的第  $i$  个量子点的位置.

我们采用 Monte-Carlo 模拟方法<sup>[3]</sup>来计算在一定的物理温度下电子系统的最低自由能,在给定参数的条件下,引入虚拟温度  $T_v$ ,然后随机选择初态进行模拟.在给定镜像电荷 QCA 电路的输入状态的条件下,当  $T_v$  下降到足够低时就能得到电路的输出态.

## 3 模拟结果

### 3.1 量子点分布误差对镜像电荷 QCA 的影响

我们设计并模拟了一个由五个元胞构成的信号传输线在不同量子点分布误差条件下的工作状态,其中  $F=45, L=20, d=10, D=20$ ,每一个元胞中的四个量子点是处于非理想的正方形顶点.图 3 中的横坐标 sigma 表示正态分布误差函数的标准差.在每个 sigma 值,随机选择了 1000 种不同的量子点误差的分布情况.纵坐标是在这 1000 种误差分布下模拟后统计出的此信号传输线能正常工作的几率.从图 3 可以看出,输入的元胞状态为“1”和“0”时,信号传输线正常工作的几率差不多,但要在两种输入情况下都正常工作的几率就相对小一些.当量子点的分布误差偏离理想位置越来越大时,得到正确的输出态的可能性越来越小. sigma 的值小于 0.1 时,信号传输线正确传输信息的几率能达到 90% 以上.

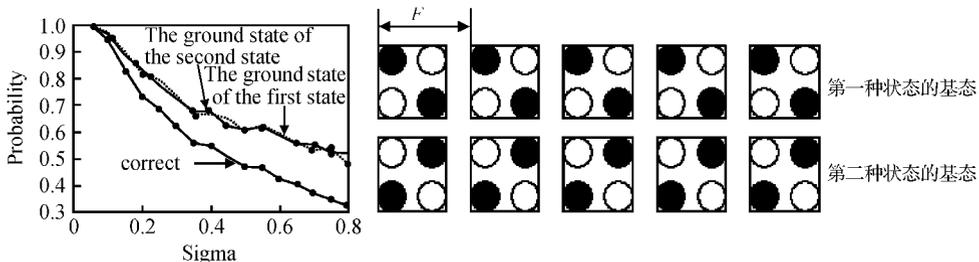


图 3 量子点分布误差对镜像电荷 QCA 的影响

Fig. 3 Influence of quantum dots' distribution imperfection on image-charge QCA

### 3.2 基态和第一激发态的能量大小随着误差增大的变化

图 4 是图 3 某一种误差分布情况下的模拟结果,其中随着  $\sigma$  的增大,量子点偏离各个顶点的方向不变,而偏离的大小线性增长.随着量子点位置的误差逐渐增大,基态的能量越来越高,而激发态的能量则越来越小,最终第一激发态的能量低于基态的能量,这时的 QCA 已不能正常工作.

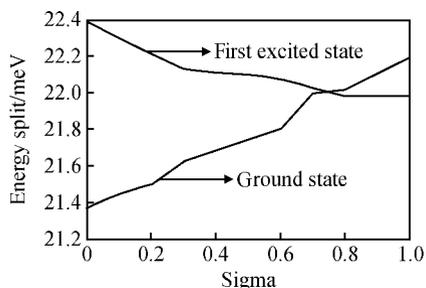


图 4 基态和激发态的能量随着量子点位置误差增大的变化情况

Fig. 4 Change of energy of ground state and first excited state against the increased imperfection of quantum dots' distribution

### 3.3 镜像电荷 QCA 可能达到的最高工作温度

我们是在物理温度为 0K 的条件下进行模拟的,在实际的运用中,镜像电荷 QCA 的信号传输线能正常工作的物理温度取决于其第一激发态和基态之间的能级差.图 5 是激发态和基态的能量差随着  $L$  增大的变化情况,其中  $F=2.5L, D=L$ ,量子点的大小随元胞尺寸的大小而调节.实线是材料的介电常数为 1 时得到的结果,虚线为介电常数为 10 时得到的结果.要使 QCA 在较高的温度下也能工作,应采用介电常数较小的材料并尽可能地减小 QCA

的尺寸.在介电常数为 1 的理想情况下,元胞大小为 5nm 时, QCA 能正常工作的温度可达到 400K 左右.

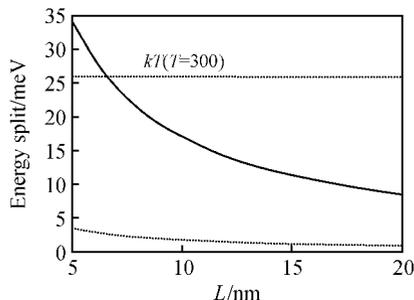


图 5 基态和激发态的能量差随着  $L$  增大的变化情况

Fig. 5 Energy difference between ground state and first excited state against  $L$

## 4 小结

在量子点生长的过程中,其位置偏离理想位置是不可避免的,本文模拟了这种误差的大小对镜像电荷 QCA 的影响.模拟结果表明当误差达到一定程度时, QCA 已不能正确地传输信息.同时我们也给出了不同元胞大小情况下的第一激发态和基态的能级差,并估算了 QCA 可能达到的工作温度.

### 参考文献

- [1] Lent C S, Tougaw P D, Porod W, et al. Quantum cellular automata. *Nanotechnology*, 1993, 4: 49
- [2] Wu N J, Shibata N, Amemiya Y. Quantum cellular automaton device using the image charge effect. *Jpn J Appl Phys*, 1998, 37: 2433
- [3] Kato M. Simulated-annealing method for fermion systems at finite temperature. *Phys Rev B*, 1995, 51: 16046

# Simulation of Imperfection on Image-Charge Quantum Cellular Automaton Using Image Charge Effect

Wang Yanzhen and Wu Nanjian

*(Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)*

**Abstract:** The influence of the imperfection of distribution of quantum dots on the behavior of QCA devices using image charge effect is investigated. The quantum dots of the cells of QCA are strictly confined on the four corners of a square cell. When considering the existing technology of manufacture of quantum dots, imperfection is unavoidable. We simulate the situation when the imperfection of the distribution of quantum dots is normal distribution. Also, we estimate the temperature on which the QCA can work correctly. The result indicates that the QCA can work properly when the error is less than 0.1. Meanwhile, if the size of the cells is decreased, the QCA can work above room temperature.

**Key words:** QCA; image charge; quantum dots; quantum cellular automaton

**EEACC:** 2560B

**Article ID:** 0253-4177(2005)S0-0261-04