

Seminar "Quantenmechanik II" Institut für Theoretische Physik Georg-August-Universität Göttingen im Wintersemester 2005/06

Quantum Dots

27. Januar 2006

Hildegard Uecker¹, Andreas $\rm Sorge^2$

Inhaltsverzeichnis

| 1 | Quantenpunkte | | 1 |
|---------|---|---|-----------------------|
| | 1.1 | Mesoskopische Systeme | 1 |
| | 1.2 | Aufbau und Herstellung von Quantenpunkten | 1 |
| | 1.3 | Physikalische Bedeutung & Anwendungen | 2 |
| 2 | Ladungstransport durch Quantenpunkte | | |
| | 2.1 | Offene und geschlossene Quantenpunkte | 4 |
| | 2.2 | Semiklassische Beschreibung | 5 |
| | 2.3 | Ballistischer Transport, Quantenbillard | 5 |
| | 2.4 | Landauer-Formel für den Leitwert (offene QP) | 5 |
| | 2.5 | Coulomb-Blockade (geschlossene QP) | 7 |
| | 2.6 | Schwache Lokalisierung | 10 |
| 3 | Chaos in Quantenpunkten | | 11 |
| | 3.1 | Die BGS-Vermutung | 11 |
| | 3.2 | Random Matrix Theory (RMT) | 12 |
| 4 | Universelle Fluktuationen in Quantenpunkten | | 14 |
| | 4 1 | Fluktuationen des Leitwerts offener Quantennunkte | |
| | 4.1 | Fluktuationen des Leitweits onener Quantenpunkte | 14 |
| | $4.1 \\ 4.2$ | Fluktuationen des Level-Abstands und der Höhe der Coulomb- | 14 |
| | $4.1 \\ 4.2$ | Fluktuationen des Level-Abstands und der Höhe der Coulomb- Peaks in geschlossenen Quantenpunkten | 14 15 |
| 5 | 4.1 4.2 Zus | Fluktuationen des Level-Abstands und der Höhe der Coulomb- Peaks in geschlossenen Quantenpunkten | 14 15 16 |
| 5 Li | 4.1 4.2 Zus terat | Fluktuationen des Level-Abstands und der Höhe der Coulomb- Peaks in geschlossenen Quantenpunkten | 14 15 16 17 |

¹hildegard@gmx.net

 $^2 and reas. sorge @stud.uni-goettingen.de$

1 Quantenpunkte

1.1 Mesoskopische Systeme

Quantenpunkte (engl. quantum dots) sind mesoskopische Systeme an der Schwelle zwischen der klassisch beschreibbaren makroskopischen Welt und dem den Gesetzen der Quantenmechanik gehorchenden Mikrokosmos ("meso-": griech. $\mu\epsilon\sigma o\zeta$ "mittel-", "zwischen-"). Sie bestehen typischerweise aus einer kleinen Region eines Halbleitermaterials mit Abmessungen im Bereich von 100 nm und werden daher auch Nanokristalle (engl. nanocrystals) genannt. Strukturen in dieser Grökenordnung heißen allgemein Nanostrukturen (engl. nanoscale structures oder submicron systems), zu denen z.B. auch Quantendrähte (engl. quantum wires) oder Kohlenstoff-Nanoröhrchen (engl. carbon nanotubes) gehören.

Mesoskopisch heißt ein System, wenn die Kohärenzlänge L_{ϕ} eines Ladungsträgers größer als oder vergleichbar mit den Abmessungen L des Systems ist $(L_{\phi} \gtrsim L)$. Die Kohärenzlänge ist die typische Distanz, die der Ladungsträger im System zurücklegt, bevor durch Kopplung mit der Umgebung (inelastische Streuung z.B. an Phononen) die Kohärenz verloren geht, der Ladungsträger also seinen wohldefinierten quantenmechanischen Zustand (der sich über das gesamte System erstreckt und eine wohldefinierte Energie besitzt) verlässt. Dieser Vorgang heißt auch *Dekohärenz* (engl. *dephasing*) und beschreibt gerade den Übergang in die klassische Welt. Kohärente Zustände haben die gleiche Energie, weisen eine feste Phasenbeziehung auf und zeichnen sich durch ihre Überlagerbarkeit aus $(P = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 - es$ treten Interferenzeffekte auf). Die Kohärenzlänge L_{ϕ} nimmt mit abnehmender Temperatur zu, sodass die von uns betrachteten Quantenpunkte bei ca. 100 mK mesoskopisch werden. Elastische Streuung an Störstellen erhalten die Kohärenz und sind durch die *mittlere freie Weglänge l* (engl. *mean free path*) des Ladungsträgers charakterisiert.

Wegen der Interferenzeffekte ist die Angabe einer (lokalen) Leitfähigkeit im Quantenpunkt nicht sinnvoll. Vielmehr ist der Ladungstransport durch mesoskopischen Halbleiterbauelementen nur noch durch den *Leitwert* als globale Eigenschaft z.B. des Quantenpunkts beschreibbar. Die Kohärenz führt daher aufgrund miteinander interferierender Wellen verschiedener Wege eines Elektrons gegenüber den "klassischen" Halbleiterbauelementen zu fundamental neuen Eigenschaften, von denen wir am Beispiel der Quantenpunkte einige studieren wollen.

1.2 Aufbau und Herstellung von Quantenpunkten

Quantenpunkte bestehen aus etwa einer Million Atomen (10^3-10^9) mit einer entsprechenden Anzahl Elektronen. Meist wird ein zweidimensionales Elektronengas (2DEG) an der Grenzfläche einer Halbleiterheterostruktur durch Metallelektroden weiter bis auf 0 Dimensionen eingeschränkt (daher der Name Quanten-"punkt"), d.h. die Ladungsträger sind in der Größenordnung ihrer De-Broglie-Wellenlänge in alle Richtungen lokalisiert. Wie in Abbildung 1 schematisch dargestellt, führt das sog. "Confinement" der Ladungsträger zu einer diskretisierten Zustandsdichte. Die Anzahl der Elektronen im Quantenpunkt lässt sich über eine angelegte Spannung, der *Gate*-Spannung V_a , bis auf 0 regulieren.

Zur Herstellung von Quantenpunkten gibt es zwei Ansätze: Der ältere, aufwändigere basiert auf der künstlichen Strukturierung eines Schichtsystems durch



Abbildung 1: Zustandsdichten D(E) des freien dreidimensionalen Elektronengases und der entsprechenden niederdimensionalen Einschränkungen [14]

Elektronenstrahllithographie und erzeugt Strukturen bis auf 10 nm. Der neuere Ansatz nutzt selbstorganisatorischen Effekte aus, sodass mittels Molekularstrahlepitaxie binnen Sekunden ausgedehnte Quantenpunktstrukturen erzeugt werden können.

Man unterscheidet zwei verschiedene Geometrien: Im *lateralen* Quantenpunkt fließt der Strom in der Ebende des 2DEG (siehe Abbildung 3), während er im *vertikalen* Aufbau (siehe Abbildung 2) senkrecht durch die 2DEG-Ebene fließt.



Abbildung 2: Aufbau eines vertikalen Quantenpunkts [10]

1.3 Physikalische Bedeutung & Anwendungen

Quantenpunkte im speziellen und Nanostrukturen im allgemeinen sind aktueller Forschungsgegenstand der Festkörperphysik und weisen ein breites Spektrum an potentiellen Anwendungen auf.



Abbildung 3: Aufbau eines lateralen Quantenpunkts [1], [13]

1.3.1 Künstliche Atome und Moleküle

Wegen ihrer diskreten Energiespektren werden Quantenpunkte häufig auch als "künstliche Atome" bezeichnet – der Unterschied zu "natürlichen" Atomen ist, dass die Energieniveaus sogar exakt durch die experimentellen Parameter einstellbar sind. Die Atomeigenschaften werden an Quantenpunkten jedoch nicht durch die Wechselwirkung mit Photonen, sondern anhand des Ladungstransports untersucht. So lässt sich an einem einzelnen Quantenpunkt das gesamte Periodensystem "künstlicher Elemente" allein durch das Variieren der angelegten Spannung untersuchen. Zudem lassen sich auch Rückschlüsse auf die Eigenschaften von Atomen ziehen, deren direkte Untersuchung experimentell nicht möglich ist. Mehr noch, auch "künstliche Moleküle" bestehend aus mehreren gekoppelten Quantenpunkten lassen sich herstellen.

1.3.2 Quantenpunktlaser

Quantenpunkte weisen wie Atome diskrete Energiespektren auf und emittieren daher beim Übergang von der Anregung in den Grundzustand ein Photon bestimmter Wellenlänge, die über die Parameter des Quantenpunktes einstellbar ist. Das macht man sich bei *Quantenpunktlasern* zunutze, die aus sehr vielen Quantenpunkten mit denselben Parametern bestehen (z.B. erzeugt durch selbstorganisiertes Wachstum).

Quantenpunktlaser sind auch wegen ihrer Effizienz und höherer erzielbarer Taktraten so interessant und finden Anwendung in der optischen Nachrichtenübertragung, aber z.B. auch in der Bildschirmtechnik.

1.3.3 Quantengatter

Ein künstliches Molekül aus zwei gekoppelten Quantenpunkten lässt sich als *Quantengatter* konfigurieren [3], wobei der eine Quantenpunkt die logische 0, der andere die logische 1 kodiert. Die Herstellung von Quantengattern mit entsprechenden Eigenschaften ist entscheidend für die Konstruktion eines Quantencomputers.

1.3.4 Einzelphoton- und Einzelladungsdetektoren

Zur optischen Quanteninformationsverarbeitung (z.B. in der Quantenkryptographie zum Bau eines Quantenrepeaters) werden effiziente Einzelphotonendetektoren benötigt. Einzelne Ladungsträger (Löcher oder Elektronen) und damit auch einzelne Photonen lassen sich in bzw. von einem Quantenpunkt nachweisen [4]. Dies ist auch für diverse Quantencomputerarchitekturen interessant.

1.3.5 Bioelektronische Schnittstellen und Nanosonden

Nanotechnik lässt sich auch zur Untersuchung und Steuerung biologischer Systeme, d.h. lebender Organismen, einsetzen [15]. So können Quantenpunkte als Schnittstelle zu lebenden Nervenzellen fungieren, indem sie durch spezielle biochemische Techniken zielgenau an die gewünschte Position auf der Zellmembran platziert werden. Dort können sie über elektrische Felder die Aktivität des Neurons beeinflussen, was z.B. für Prothesen von großer Bedeutung ist. Um Vorgänge im Zellinneren zu untersuchen, können als intrazelluläre *Nanosonden* preparierte Quantenpunkte in Zellen eingeschleust werden. Auch in der Bioelektronik kommt es darauf an, Quantenpunkte mit wohldefinierten Parametern und Verhalten herstellen zu können.

2 Ladungstransport durch Quantenpunkte

2.1 Offene und geschlossene Quantenpunkte



Abbildung 4: Schema des Ladungstransports in der lateralen und vertikalen Geometrie [11]

Für den uns interessierenden Ladungstransport durch Quantenpunkte sind die Zuleitungen (engl. *leads*) entscheidend, ein Transportschema ist in Abbildung 4 dargestellt. Die Stärke der Kopplung zwischen den Zuleitungen und dem Quantenpunkt kann experimentell variiert werden. Ist die Kopplung stark, so können die Ladungsträger klassisch erlaubt praktisch ungehindert den Übergang Zuleitung-Quantenpunkt passieren, man spricht von *offenen Quantenpunkten*. Eine sehr kleine Kopplung hingegen führt dazu, dass die Elektronen die Kontakte nur noch durchtunneln können, ein *geschlossener Quantenpunkt* liegt vor.

Wir werden sehen, dass der Transport durch einen offenen Quantenpunkt beschrieben werden kann durch die ballistische, chaotische Bewegung eines mit sich selbst interferierenden nicht-wechselwirkenden Elektrons, wohingegen beim geschlossenen Quantenpunkt die Coulomb-Wechselwirkung und räumliche Fluktuationen der Wellenfunktion an den Tunnelkontakten im Vordergrund stehen.

2.2 Semiklassische Beschreibung

Zur Beschreibung von Transportvorgängen in einem quantenmechanischen System bedient man sich oft der *semiklassischen* Näherung, in der man Quanteneffekte unter der Annahme klassischer Trajektorien untersucht³.

2.3 Ballistischer Transport, Quantenbillard

Der Ladungstransport durch einen Quantenpunkt erfolgt diffusionsgestützt, wenn die mittlere freie Weglänge l der Ladungsträger kleiner als die Abmessung L des Quantenpunktes ist.



Abbildung 5: Diffusionsgestützter (l < L) und ballistischer (l > L) Transport durch einen Quantenpunkt [1]

Ist jedoch l > L, so erfolgt der Ladungstransport nicht durch Streuung an Störstellen, sondern durch Reflexion von den Wänden (siehe Abbildung 5). Im folgenden wollen wir uns mit diesen *ballistischen* Quantenpunkten auseinandersetzen. Die Bewegung eines Elektrons in einem solchen Quantenpunkt lässt sich vergleichen mit der Bewegung eines Teilchens in einem zweidimensionalen *Billard*, d.h. einem irgendwie geformten Potentialtopf, einem System mit zwei Freiheitsgraden.

Die klassische Bewegung in einem solchen Billard ist integrabel (regulär, nicht-chaotisch), wenn die Wände symmetrisch geformt sind, z.B. in einem rechtwinkligen Dreieck, Rechteck oder Kreis. Bei kleinen Abweichungen von diesen Formen wird die Bewegung zumindest in Teilen des Phasenraumes chaotisch (z.B. bei einem zitronenförmigen Billard wie in Abbildung 6 dargestellt) oder im gesamten Phasenraum chaotisch (Stadionbillard, siehe Abbildung 7).

Im ballistischen Transportregime ist die relevante Zeitskala gegeben durch die *ergodische Zeit* τ_c , die der Zeit eines "Durchflugs" durch den Quantenpunkt entspricht. Die entsprechende Energieskala ist die *ballistische Thouless-Energie* $E_T = \hbar/\tau_c$. Im folgenden gehen wir davon aus, dass sich die Ladungsträger hinreichend lange im Quantenpunkt aufhalten, bevor sie ihn im Mittel nach der Zeit $\tau_{\text{escape}} \gg \tau_c$ wieder verlassen.

2.4 Landauer-Formel für den Leitwert (offene QP)

Nach Landauer kann man den Quantentransport durch eine mesoskopische Struktur als ein Streuproblem ansehen. Abbildung 8 zeigt den Fall eines Quantenpunktes mit zwei Zuleitungen mit der Breite W, auf den wir uns beschränken wollen.

³analog z.B. zum Unterschied zwischen Geometrischer Optik und Wellenoptik, die beide sog. *Hochfrequenznäherungen* unterschiedlichen Grades darstellen



Abbildung 6: Ein zitronenförmiges Billard zeigt chaotisches Verhalten (links) und quasiperiodische Orbits (Mitte und rechts). Jeweils gegenübergestellt sind oben die klassischen Orbits und unten die numerisch ermittelten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $|\Psi|^2$ eines entsprechenden quantenmechanischen Eigenzustands. [8]



Abbildung 7: Wellenfunktionen Ψ verschiedener quantenmechanischer Eigenzustände des stadionförmigen Billards. Linien hoher Amplitude entsprechen klassischen periodischen Orbits. [8]



Abbildung 8: Offener Quantenpunkt mit zwei (zweidimensionalen) Zuleitungen der Breit
eW[6]

2 LADUNGSTRANSPORT DURCH QUANTENPUNKTE

Unter der Randbedingung, dass die Wellenfunktion außerhalb der Zuleitungen und des Quantenpunktes verschwindet, und unter der Annahme, dass sich die Elektronen entlang der *x*-Achse bewegen, ergeben sich als Lösungen der Schrödingergleichung:

$$\Psi(x,y) = \frac{1}{k_x W} \cos(k_y y) \exp(\pm i k_x x) \quad , \quad k_x^2 + k_y^2 = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$
(1)

Die Anzahl Λ der in den Zuleitungen aufgrund der Quantisierung von $k_y = (n + \frac{1}{2})\frac{\pi}{W}$ jeweils ausbreitungsfähigen Moden (oder Kanälen) ist dann $\Lambda = \operatorname{int}(\frac{kW}{\pi})$ (abhängig von k bzw. E).

Seien nun t_{nm} der Transmissionskoeffizient der linken Zuleitung (Mode $n = 1, 2, ..., \Lambda$) in die rechte Zuleitung ($m = 1, 2, ..., \Lambda$), r_{nm} der Reflexionskoeffizient der linken Zuleitung und t'_{nm} und r'_{nm} die entsprechenden Koeffizienten für die rechte Zuleitung. Der Transport ist somit durch die $2\Lambda \times 2\Lambda$ -Streumatrix S beschrieben:

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \tag{2}$$

D.h. für eine von links kommende Welle beschreiben die Reflexionsmatrix r die reflektierte Welle und die Transmissionsmatrix t die in die rechte Zuleitung transmittierte Welle (analog für r', t'). Falls keine Spin-Bahn-Kopplung vorliegt, wovon wir im folgenden ausgehen, ist S unitär ($SS^{\dagger} = 1$). Ohne Magnetfeld (B = 0) ist S sogar symmetrisch ($SS^{T} = 1$).

Die von außen angelegte Spannung V_{sd} (engl. source-drain voltage) beeinflusst nun die Energie E der Elektronen und die Zahl der verfügbaren Moden. Der Stromfluss pro Mode und Energie des Elektrons eV ist jedoch quantisiert bei $\frac{2e}{h}$, wobei die Spinentartung berücksichtigt wurde. Der Anteil der von links nach rechts transmittierten Elektronen ist $T_{12} := \sum_{m,n} |t_{mn}|^2 = \operatorname{Tr} tt^{\dagger}$, woraus sich die Landauer-Formel für den Leitwert G (bei der Temperatur T = 0) ergibt zu:

$$G = \frac{2e^2}{h}T_{12} = \frac{2e^2}{h}\operatorname{Tr} tt^{\dagger}$$
(3)

Landauers Formel lässt sich gut für offene Quantenpunkte anwenden, bei denen wir von nicht-wechselwirkenden Teilchen ausgegangen sind. Bei geschlossenen Quantenpunkten müssen jedoch Wechselwirkungen zwischen den Ladungsträgern berücksichtigt werden, sodass (3) so nicht angewendet werden kann.

2.5 Coulomb-Blockade (geschlossene QP)

In einem geschlossenen Quantenpunkt (mit extrem schwacher Kopplung an die Elektronen-Reservoirs der Zuleitungen) ist die Ladung quantisiert, d.h. der Zustand des Quantenpunkts ist durch die Zahl N der Elektronen, die die diskreten Energieniveaus des Quantenpunkts sind der Reihe nach besetzen, charakterisiert.

Um ein weiteres Elektron hinzuzufügen (Übergang $N \to N + 1$), muss wegen der Coulomb-Wechselwirkung mit den im Quantenpunkt bereits vorhandenen Elektronen die Energie $\frac{e^2}{C}$ aufgebracht werden, wobei C die Kapazität des Quantenpunktes ist, die wir als unabhängig von der Zahl bereits vorhandener Elektronen annehmen (*constant-interaction model (CI-Modell*)). Weiterhin gehen wir zunächst davon aus, dass auch das diskrete Energiespektrum nicht von N abhängt.

2 LADUNGSTRANSPORT DURCH QUANTENPUNKTE

Die Grundzustandsenergie U(N) des Quantenpunkts im CI-Modell beträgt

$$U(N) = \frac{1}{2C} \left(e(N - N_0) - C_g V_g \right)^2 + \sum_N E_N$$
(4)

mit $N = N_0$ für $V_g = 0$. $C_g V_g$ repräsentiert die von der Gate-Spannung im Quantenpunkt induzierte (kontinuierliche) Ladung. Das elektrochemische Potential $\mu(N) := U(N) - U(N-1)$ ist dann:

$$\Rightarrow \mu(N) = (N - N_0 - \frac{1}{2})\frac{e^2}{C} - \frac{C_g}{C}eV_g + E_N$$
(5)

Für die Energie $\Delta \mu(N) = \mu(N+1) - \mu(N)$, die man beim Hinzufügen eines Elektrons aufbringen muss, gilt also

$$\Rightarrow \Delta \mu(N) = \frac{e^2}{C} + \Delta E(N) \tag{6}$$

wobei $\Delta E(N) = E_{N+1} - E_N$ der Abstand des höchsten besetzten Niveaus E_N zum niedrigsten unbesetzten Niveau E_{N+1} ist (und damit die Energie der ersten Anregung darstellt).



Abbildung 9: Potentiallandschaft eines geschlossenen Quantenpunkts [10]

Wie in Abbildung 9 dargestellt, kann ein Elektron nur dann durch den Quantenpunkt tunneln, wenn $\mu_l > \mu(N+1) > \mu_r$ gilt, wobei μ_r und μ_l die chemischen Potentiale der Zuleitungen sind und ihre Differenz durch die angelegte Spannung gegeben ist. Die Zahl der Elektronen schwankt in diesem Fall zwischen N und N+1 (Entartungspunkt), es fließt ein Strom, und zwar genau eines einzelnen Elektrons (single electron tunneling (SET)).

Liegt $\mu(N+1)$ hingegen höher als μ_r , so ist kein Stromfluss möglich. Dieses Phänomen ist unter dem Namen *Coulomb-Blockade* bekannt. Wir sind dabei

2 LADUNGSTRANSPORT DURCH QUANTENPUNKTE

stillschweigend von dem Regime der Quanten-Coulomb-Blockade ausgegangen, in dem die Temperatur klein gegen den mittleren Niveauabstand Δ und dieser klein gegen die Coulomb-Energie ist $(kT \ll \Delta \ll \frac{e^2}{C})$.

Das elektrochemische Potential des Quantenpunkts kann durch die Gate-Spannung kontinuierlich verändert werden. Es treten dabei immer wieder Peaks im Leitwert auf, dazwischen ist er gleich Null. Man spricht von *Coulomb-Oszillationen*. Der Abstand zwischen zwei benachbarten Peaks Δ_2 entspricht dabei gerade der entsprechenden Additionsenergie $\Delta \mu(N) \equiv \Delta_2$.

Wie man in Abbildung 11 sieht, ist die Höhe der Peaks beträchtlichen Schwankungen unterworfen. Dies wollen wir später im Rahmen der Random Matrix Theory diskutieren.

2.5.1 Wenige Elektronen im harmonischen Potential

Ein kreisförmiger geschlossener Quantenpunkt, in dem sich nur wenige Elektronen befinden, kann durch ein harmonisches Potential beschrieben werden. Als Spektrum erwarten wir daher die Energieeigenwerte des zweidimensionalen harmonischen Oszillators:

$$E_{n,l} = (2n + |l| + 1)\hbar\omega_0 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$
(7)

Das erste Niveau liegt demnach bei $E = \hbar \omega_0$ und kann mit zwei Elektronen (Spinentartung) besetzt werden. Die folgenden Niveaus sind – wie im Wasserstoffatom – entartet, so kann das zweite Niveau $E = 2\hbar\omega_0$ bereits vier Elektronen aufnehmen $(n = 0, l = \pm 1)$ etc.



Abbildung 10: Schalenstruktur eines geschlossenen Quantenpunkts mit wenigen Elektronen im harmonischen Potential mit den Leitwert-Peaks und Additionsenergien [10]

Es ergibt sich eine Schalenstruktur, die aus Abbildung 10 ersichtlich wird. Innerhalb einer Schale gilt jeweils $\Delta E = 0 \Rightarrow \mu(N) = \frac{e^2}{C}$.

2.5.2 Viele Elektronen

Ab ca. $N \approx 30$ Elektronen kann das Potential des geschlossenen Quantenpunkts nicht länger als parabolisch angesehen werden, zudem wird der Niveauabstand ΔE klein gegen die Coulomb-Energie $\frac{e^2}{C}$. Den Übergang von wenigen zu vielen Elektronen verdeutlicht Abbildung 11.



Abbildung 11: Coulomb-Blockade-Peaks eines geschlossenen Quantenpunkts für $N = 0, \dots, 41$ Elektronen [10]

2.6 Schwache Lokalisierung

In der klassischen Betrachtung eines offenen irregulär geformten Quantenpunktes bzw. des entsprechenden Billards mit zwei Zuleitungen beträgt die klassische Reflexionswahrscheinlichkeit eines injizierten Teilchens $\mathcal{R} = \frac{1}{2}$. Das Teilchen "vergisst" im chaotischen System seine Herkunft und verlässt das System mit gleicher Wahrscheinlichkeit durch eine der beiden Zuleitungen.

Mit Feynmans Pfadintegralformalismus lässt sich die quantenmechanische Reflexionswahrscheinlichkeit berechnen. Die Wahrscheinlichkeit, wieder am Ort der Zuleitung anzukommen, ist das Betragsquadrat der Summe der Amplituden aller geschlossenen Pfade: $P = |\sum A_i|^2 = \sum |A_i|^2 + \sum A_i A_j^*$. Der erste Summand ist die klassische Reflexionswahrscheinlichkeit, während der zweite von quantenmechanischen Interferenzeffekten herrührt. Da das Teilchen sich kohärent, d.h. mit einer festen Phasenbeziehung, fortbewegt, verbleibt beim zweiten Summanden gerade die Summe der Amplituden aller Paare der jeweils umgekehrten Pfade, die bei Zeitumkehrsymmetrie konstruktiv interferieren und den klassischen Wert gerade verdoppeln. In diesem Fall steigt also die Reflexionswahrscheinlichkeit, das Teilchen "erinnert" sich also trotz des klassischchaotischen Systems an seinen Ursprungsort. Daher spricht man von schwacher Lokalisierung (engl. weak localization).

Bei gebrochener Zeitumkehrsymmetrie (z.B. im Magnetfeld) interferieren auch die umgekehrten Pfade destruktiv, sodass der klassische Wert unverändert bleibt.

Eine genauere Betrachtung mithilfe der Zufallsmatrizentheorie [9] liefert für den Erwartungswert der Transmission:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}\Lambda + \delta T \tag{8}$$

Die Abweichung vom klassischen Erwartungswert ist in Abwesenheit eines Magnetfeldes $\delta T = -\frac{1}{4}$ (schwache Lokalisierung), während sie im Magnetfeld verschwindet ($\delta T = 0$).

3 Chaos in Quantenpunkten



Abbildung 12: Vergleich der Leitwert-Abhängigkeiten von offenen und geschlossenen Quantenpunkten: diese abhängig von der Zahl $N(V_g)$ der Elektronen, jene abhängig von der Fermi-Wellenzahl $k_F(V_{sd})$ [2]

Quantenpunkte sind mesoskopische Systeme, bei denen semiklassische Betrachtungen durchaus ihre Berechtigung haben und den Trajektorien der Elektronen noch eine gewisse Bedeutung zukommt.

Das Chaos in Quantenpunkten kann man sich deshalb ganz im klassischen Sinne enstanden denken durch die Streuung der Elektronen an den Verunreinigungen bzw. den unregelmäßigen Wänden des Quantenpunkts.

Andererseits liegen Phasenkohärenz und damit Interferenzeffekte vor. Chaotisches Verhalten kommt in dieser Betrachtungsweise dadurch zustande, dass das Interferenzmuster höchst sensibel auf die Veränderung äußerer Parameter wie etwa der geometrischen Form des Quantenpunkts oder eines anliegenden Magnetfelds reagiert.

3.1 Die BGS-Vermutung

"Spectra of time-reversal-invariant systems whose classical analogs are K systems show the same fluctuation properties as predicted by $GOE(\ldots)$." [5]

Die Bohigas-Giannoni-Schmit-Vermutung besagt, dass die statistischen Fluktuationen ("das Chaos") von Quantensystemen, deren klassisches Analogon klassisches chaotisches Verhalten zeigt, mit Hilfe der Random Matrix Theory (s.u.) behandelt werden können. Anwendbar ist sie also z.B. auf ein Quantensystem in Form eines Stadions, nicht aber auf ein Quantensystem in Form eines (idealen) Kreises.

Da Quantenpunkte mit mehr als 50 Elektronen kaum noch eine hochsymmetrische Form haben, hat man im Umgang mit Quantenpunkten eigentlich immer mit chaotischen Systemen im Sinne der BGS-Vermutung zu tun.

3.2 Random Matrix Theory (RMT)

3.2.1 Die Idee der RMT

Die RMT geht von maximaler Unkenntnis des Hamilton-Operators aus. Man konstruiert deshalb Ensembles von zufallsverteilten Hamilton-Operatoren, um die statistischen Eigenschaften eines Ensembles von Systemen zu untersuchen, wobei der BGS-Vermutung zufolge durch die Ergebnisse auch die Eigenschaften eines einzelnen Systems beschrieben werden. Dabei ist die einzige Bedingung, dass die Hamilton-Operatoren mit den Symmetrien des Systems verträglich sind.

Schon an dieser Stelle bemerkt man, dass es sich bei den aus der RMT gewonnenen Erkenntnissen um universelle Eigenschaften handeln muss, die lediglich von der Symmetrie des Systems, aber nicht von seiner konkreten Realisierung abhängen.

3.2.2 Die drei Klassen von Zufallsmatix-Ensembles

Es lässt sich zeigen, dass es in Abhängigkeit der Symmetrie drei verschiedene Klassen von Zufallsmatrix-Ensembles gibt (die anderen Ensembles ergeben sich dann als irreduzible Darstellungen), die nach den die jeweilige Symmetrie erhaltenden Basistransformationsmatrizen benannt werden:

- 1. Invarianz des Systems unter Zeitumkehr und Rotationen oder Invarianz unter Zeitumkehr, keine Invarianz unter Rotationen, aber ganzzahliger Gesamtdrehimpuls: Der Hamiltonoperator lässt sich als real-symmetrische Matrix darstellen. Man spricht vom **orthogonalen** Ensemble.
- Invarianz unter Rotationen, aber Invarianz unter Zeitumkehr gebrochen: Der Hamiltonperator lässt sich als komplex-hermitische Matrix darstellen. Das System heißt unitär.
- 3. Invarianz unter Zeitumkehr, keine Invarianz unter Rotationen, halbzahliger Gesamtdrehimpuls: Die Matrixelemente des Hamiltonoperators sind reale Quatertionen, d.h. Linearkombinationen mit realen Koeffizienten aus der Einheitsmatrix und den Pauli-Spin-Matrizen. Dieses Ensemble wird **symplektisch** genannt.

3.2.3 Gaußsche Ensembles

In der folgenden Herleitung beschränken wir uns auf orthogonale Ensembles, das Ergebnis gilt jedoch allgemein.

Sei P(H)dH die Wahrscheinlichkeit, einen Hamiltonoperator zu finden, dessen Matrixelemente in einem Intervall d H_{ij} um H_{ij} liegen. Um eine Verteilungsfunktion P(H) für die Hamiltonoperatoren im Ensemble hezuleiten, stellt man zwei Forderungen (Porter und Rosenzweig):

- 1. Die Verteilung ist invariant unter orthogonalen Transformationen.
- 2. Alle unabhängigen Matrixelemente sind stochastisch unabhängig, d.h. $P(H) = \prod_{i \leq j} P_{ij}(H_{ij})$.

Eine Verteilungsfunktion, die diesen Forderungen genügt, ist:

$$P(H) \propto e^{(-\beta/2a^2)\mathrm{Tr}H^2} \tag{9}$$



Abbildung 13: Wigner-Dyson-Verteilung für GOE und GUE

wobei β die Anzahl realer Komponenten eines Matrixelements (also $\beta = 1, 2, 4$) ist. Man spricht je nach Fall vom Gaußschen orthogonalen Ensemble (GOE), vom Gaußschen unitären Ensemble (GUE) oder vom Gaußschen symplektischen Ensemble (GSE).

Eine Herleitung über Maximierung der Entropie (d.h. der Unwissenheit) $S[P(H)] = -\int dHP(H) \ln P(H)$ unter den Bedingungen der Normiertheit und der Beschränktheit der Eigenwerte führt zum selben Ergebnis.

Diagonalisierung des Hamiltonoperators liefert die Verteilungsfunktion für die Energieeigenwerte:

$$P(E_1, E_2, ... E_N) \propto (\prod_{\lambda < \mu} (|E_\lambda - E_\mu|^\beta) e^{-(\beta/2a^2) \sum_{\nu} E_\nu^2}$$
(10)

Von daher gelangt man weiter zur Verteilung des Abstands s zweier benachbarter Energielevel:

$$P_{WD}(s) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} s e^{-(\pi/4)s^2} & (\text{GOE}) \\ \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-(4/\pi)s^2} & (\text{GUE}) \\ \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 e^{-(64/9\pi)s^2} & (\text{GSE}) \end{cases}$$
(11)

(Wigner-Dyson-Verteilung)

Im Folgenden beschäftigen wir uns hauptsächlich mit den ersten beiden Ensembles. Dabei ist wichtig zu wissen, dass die Zeitumkehrinvarianz insbesondere durch Anlegen eines Magnetfelds gebrochen wird.

3.2.4 Zugang über die Streumatrix: circular ensemble

Bisher wurde der Hamiltonoperator als zufallsverteilt angenommen. Dieses Vorgehen setzt jedoch zunächst ein abgeschlossenes System mit definierten Eigenzuständen voraus, ist also für geschlossene, nicht aber für offene Quantenpunkte gültig. Um Aussagen über den Leitwert offener Quantenpunkte treffen zu können, ist nicht der Hamiltonoperator, sondern die Streumatrix entscheidend, die maßgeblich von den Eigenschaften der Leitung abhängt. Im Zugang über den Hamiltonoperator gelangt man zur Streumatrix mit Hilfe der R-Theorie. Stattdessen kann man aber auch direkt die Streumatrix S als zufallsverteilt betrachten. Seien $e^{i\theta}$ die Eigenphasen (elastische Streuung!). Man geht dann von folgender Verteilungsfunktion aus:

$$P(\theta_1, \dots \theta_N) \propto \prod_{i < j} |e^{i\theta_i} - e^{i\theta_j}|^\beta \tag{12}$$

(circular ensemble)

4 Universelle Fluktuationen in Quantenpunkten

4.1 Fluktuationen des Leitwerts offener Quantenpunkte

In der Praxis untersucht man häufig den Leitwert eines Systems in Abhängigkeit eines äußeren Parameters (Gate-Spannung, Magnetfeld...), da selbige eine direkt zu messende Größe darstellt. Im Folgenden sollen nun die Ergebnisse für die Verteilung des Leitwerts, die man aus der RMT erhält, vorgestellt und kurz mit experimentell ermittelten Daten verglichen werden.

Aus der Verteilung der Streumatrix

$$S = \left(\begin{array}{cc} r & t' \\ t & r' \end{array}\right)$$

lässt sich die Verteilung der Transmissionseigenwerte τ_a von tt^{\dagger} und daraus des Leitwerts g (in Einheiten von $2e^2/h$) ermitteln:

$$P(g) = \frac{1}{2}\beta g^{(\beta-2)/2}$$
(13)

(Ergebnis für zwei Leitungen mit jeweils einer Mode)

Man sieht, dass in Abwesenheit eines magnetischen Felds ($\beta = 1$) die Wahrscheinlichkeit für kleine Werte größer ist als für große, in Anwesenheit eines Magnetfelds ($\beta = 2$) liegt eine Gleichverteilung vor.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Leitwerts ist abhängig von der Anzahl Λ der Moden in den Leitungen. Im Limes $\Lambda \to \infty$ liegt eine Gaußverteilung vor.

Für Mittelwert und Standardabweichung des Leitwerts erhält man (zwei Leitungen mit $\Lambda_1 = \Lambda_2 = \Lambda$):

$$\bar{g} = \frac{\Lambda}{2} - \frac{\Lambda}{2(2\lambda - 1 + \beta/2)} \left(\frac{2}{\beta} - 1\right) \to \frac{\Lambda}{2} - \frac{1}{4} \left(\frac{2}{\beta} - 1\right) \tag{14}$$

$$\sigma^{2}(g) = \frac{2}{\beta} \frac{\Lambda^{2} (\lambda - 1 + 2/\beta)^{2}}{(2\lambda + 2 + 2/\beta)(2\Lambda - 1 + 4/\beta)(2\Lambda - 1 + 2/\beta)^{2}} \to \frac{1}{8\beta}$$
(15)

Im Limes $\Lambda \to \infty$ ist der dominierende Term im mittleren Leitwert $\frac{\Lambda}{2}$. Dies entspricht gerade dem klassisch zu erwartenden Wert: Im Falle vollkommenen Chaos und idealer Leitungen verläßt ein Elektron den Quantenpunkt mit gleicher Wahrscheinlichkeit durch die linke oder die rechte Leitung. Der zweite Term stellt die Korrektur durch den Effekt der schwachen Lokalisierung dar. Für $\beta = 2$ verschwindet dieser Term.

Eine wichtige Erkenntnis liefert auch die Standardabweichung: Die Schwankungen des Leitwerts hängen im Limes $\Lambda \to \infty$ nicht mehr vom mittleren Leitwert oder der Größe (und damit der Anzahl der Moden in den Leitungen) ab,



Abbildung 14: Verteilung des Leitwerts bei endlichen Temperaturen ohne äukeres Magnetfeld (a und b) und mit äußerem Magnetfeld (c und d) - Punkte: Messwerte; gepunktete Linien: theoretische Vorhersagen aus RMT ohne Berücksichtigung thermischer Effekte (T = 0); gestrichelte Linien: theoretische Vorhersagen unter Berücksichtigung von Dekohärenz, durchgezogene Linien: theoretische Vorhersagen unter Berücksichtigung sowohl von Dekohärenz als auch von thermischem Verschmieren [1]

d.h. sie sind im Grenzwert unendlich vieler Moden universell und bewegen sich in der Größenordnung e^2/h .

Abbildung 14 zeigt die gemessene und die theoretische Verteilung des Leitwerts. Man sieht, daħ die experimentell ermittelten Werte kaum mit Formel 13 übereinstimmen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass thermische Effekte bisher vernachlässigt wurden. Selbige führen zum einen zu thermischem Verschmieren, zum anderen zu Dekohärenz. Unter Berücksichtigung dieser Effekte erhält man sehr gute Ergebnisse.

4.2 Fluktuationen des Level-Abstands und der Höhe der Coulomb-Peaks in geschlossenen Quantenpunkten

Zunächst stellt sich die Frage, inwieweit die Verteilung der Abstände der Energieniveaus in geschlossenen Quantenpunkten mit der Wigner-Dyson-Verteilung übereinstimmt. Dazu betrachtet man die Abstände zwischen den Peaks in den Coulomb-Oszillationen. Nach Formel 6 sollten sie gerade der um e^2/C verschobenen Wigner-Dyson-Verteilung gehorchen. Man erkennt in Abbildung 15 jedoch, dass die gemessenen Werte eher einem Gaußprofil ähneln. Diese Abweichung lässt sich qualitativ leicht erklären: In Formel 6 wird ein konstantes Wechselwirkungspotential zwischen den Elektronen angenommen, was sicherlich eine starke Vereinfachung darstellt. Durch das Hinzufügen eines Elektrons ändert sich das Potential des Quantenpunkts und damit auch die Energielevel. ΔE stellt also gar nicht die Differenz der Energieniveaus in einem definierten Quantenpunkt



Abbildung 15: Theoretische Kurven und experimentelle Werte für die Verteilung der Energielevel-Abstände [1]

dar. Diesem Umstand muss in der Auswertung der Ergebnisse Rechnung getragen werden.

Weiterhin lässt sich die Verteilung der Peak-Höhen betrachten: Für die Peak-Höhe der Coulomb-Oszillationen gilt:

$$G_{\lambda}^{Peak} = \frac{e^2}{h} \frac{\pi \bar{\Gamma}}{4kT} g_{\lambda} \tag{16}$$

 mit

$$g_{\lambda} = \frac{2}{\bar{\Gamma}} \frac{\Gamma^{l}_{\lambda} \Gamma^{r}_{\lambda}}{\Gamma^{l}_{\lambda} + \Gamma^{r}_{\lambda}}$$

Dabei sind $\Gamma_{\lambda}^{l/r}/\hbar$ die Tunnelraten aus dem Energieniveau E_{λ} in die linke bzw. rechte Leitung und $\bar{\Gamma} = \bar{\Gamma}_{\lambda}^{l} + \bar{\Gamma}_{\lambda}^{r}$ der Mittelwert.

Aus der Verteilung von Γ ergibt sich für die Verteilung der Peakhöhen gin Einheiten von $(e^2/h)(\pi\bar{\Gamma})/(4kT)$ im Falle statistisch unabhängiger Leitungen mit jeweils einer Mode:

$$P_{GOE}(g) = \sqrt{2/(\pi g)}e^{-2g}$$
 (17)

$$P_{GUE}(g) = 4ge^{-2g}[K_0(2g) + K_1(2g)]$$
(18)

mit den modifizierten Besselfunktionen K_0 und K_1 .

In Abbildung 16 sieht man einen Vergleich zwischen Theorie und experimentellen Daten.

Für den Mittelwert des Leitwerts in Abhängigkeit von der Anzahl Λ der Moden in den Leitungen gilt:

$$\bar{g} = \begin{cases} \frac{\Lambda^2}{2(\Lambda+1)} & (\text{GOE})\\ \frac{\Lambda^2}{2\Lambda+1} & (\text{GUE}) \end{cases}$$
(19)

Im Falle nur einer Mode ist der Mittelwert also ohne Magnetfeld 1/4 und mit Magnetfeld 1/3. Dies ist wiederum auf die schwache Lokalisierung zurückzuführen, wobei der Effekt kleiner ist als bei offenen Quantenpunkten. Die Varianz des Leitwerts beträgt $\Lambda = 1$ 1/8 für GOE und 4/45 für GUE.

5 Zusammenfassung

Quantenpunkte sind "0-dimensionale" mesoskopische Systeme, in denen Phasenkohärenz vorliegt. Je nach Kopplung an die Außenwelt unterscheidet man



Abbildung 16: Verteilung der Peakhöhen bei B = 0 (links) und bei $B \neq 0$ (rechts), T = 75 mK [1]

dabei offene und geschlossene Quantenpunkte. In Abhängigkeit äußerer Paramter beobachtet man Fluktuationen im Leitwert (offene Quantenpunkte) bzw. in Abstand und Höhe der Coulomb-Peaks (geschlossene Quantenpunkte). Diese Fluktuationen sind insofern universell, als dass sie nur von den Symmetrien des Systems und eventuell der Anzahl der Moden in den Leitungen abhängen, nicht aber etwa von der konkreten Form des Systems. Theoretisch beschrieben werden die statistischen Eigenschaften eines chaotischen Quantenpunkts der BGS-Vermutung zufolge durch die Random Matrix Theory. Diese nimmt maximale Unkenntnis des Hamiltonoperators an und konstruiert Ensembles zufallsverteilter Hamiltonoperatoren, die lediglich mit den Symmetrien des Systems übereinstimmen müssen. Um jedoch tatsächlich gute Übereinstimmungen mit dem Experiment zu finden, müssen häufig weitere Effekte wie z.B. Dekohärenz berücksichtigt werden.

Literatur

- ALHASSID, Yoram: The statistical theory of quantum dots. In: Rev. Mod. Phys. 72 (2000), Nr. 4, S. 895–968
- [2] ALHASSID, Yoram: Chaos and Interactions in Quantum Dots. In: BERG-GREN, Karl-Fredrik; ÅBERG, Sven (Hrsg.): Quantum Chaos 2K : Proceedings of Nobel Symposium 116 : World Scientific Publishing, 2001. – ISBN 981-02-4711-7
- [3] BAYER, M.; HAWRYLAK, P.; HINZER, K.; FAFARD, S.; KORKUSINSKI, M.; WASILEWSKI, Z. R.;, STERN, O.; FORCHEL, A.: Coupling and Entangling of Quantum States in Quantum Dot Molecules. In: *Science* 291 (2001), Nr. 5503, S. 451–453
- [4] BLAKESLEY, J. C.; SEE, P.; SHIELDS, A. J.; KARDYNAL, B. E.; ATKIN-SON, P.; FARRER, I.; RITCHIE, D. A.: Efficient Single Photon Detection by Quantum Dot Resonant Tunneling Diodes. In: *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005), Nr. 6

- [5] BOHIGAS, O.; GIANNONI, M. J.; SCHMIT, C.: Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws. In: *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984), Nr. 1
- [6] BROUWER, Piet W.: On the Random-Matrix Theory of Quantum Transport. Leiden, Universität, Diss., 1997
- [7] GODIJN, Sandra: *Quantum Chaos in Ballistic Dots*. Würzburg, Universität, Fakultät für Physik und Astronomie, Diss., 1999
- [8] HELLER, Eric J.; TOMSOVIC, Steven: Postmodern Quantum Mechanics. In: Phys. Today 46 (1993), Nr. 7, S. 38-46
- [9] JALABERT, R. A.; PICHARD, J.-L.; BEENAKKER, C. W. J.: Universal Quantum Signatures of Chaos in Ballistic Transport. In: *Europhys. Lett.* 27 (1994), S. 255
- [10] KOUWENHOVEN, Leo P.; AUSTING, D. G.; TARUCHA, Seigo: Few-electron quantum dots. In: *Rep. Prog. Phys.* 64 (2001), S. 701–736
- [11] KOUWENHOVEN, LEO P. ; MARCUS, Charles M. ; MCEUEN, Paul L. ; TA-RUCHA, Seigo ; WESTERVELT, Robert M. ; WINGREEN, Ned S.: Electron Transport in Quantum Dots. In: SOHN, Lydia L. ; KOUWENHOVEN, Leo P. ; SCHÖN, Gerd (Hrsg.): Mesoscopic Electron Transport : Proceedings of the NATO Advanced Study Institute : Springer, 1997 (NATO Science Series E 345). - ISBN 0-7923-4737-4
- [12] MURAYAMA, Yoshimasa: Mesoscopic Systems : Fundamentals and Applications. Weinheim : Wiley-VCH, 2001. – ISBN 3–527–29376–0
- [13] SCHÖNENBERGER, Christian (Hrsg.). URL: http://pages.unibas.ch/physmeso. – Zugriff am 23.01.2006. – Universität Basel
- [14] WEBER, Alexander: Optische Untersuchungen von Intersubniveau-Übergängen in selbstorganisierten InGaAs/GaAs-Quantenpunkten. Berlin, Technische Universität, Fakultät II, Diss., 2005
- [15] WINTER, Jessica O.; LIU, Timothy Y.; KORGEL, Brian A.; SCHMIDT, Christine E.: Recognition Molecule Directed Interfacing Between Semiconductor Quantum Dots and Nerve Cells. In: Adv. Mater. 13 (2001), Nr. 22, S. 1673–1677