



TAMPEREEN TEKNILLINEN YLIOPISTO  
TAMPERE UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

**ALPI TOLVANEN**  
**KVANTTIPISTESOLUAUTOMAATTIEN MALLINTAMINEN**  
**POLKUINTEGRAALI-MONTE CARLO -MENETELMÄLLÄ**

Kandidaatintyö

Tarkastajat: Prof. Tapio Rantala  
ja Juha Tiihonen  
17.05.2018

# TIIVISTELMÄ

**ALPI TOLVANEN:** Kvanttipistesoluautomaattien mallintaminen polkuintegraali-Monte Carlo -menetelmällä

Tampereen teknillinen yliopisto

Kandidaatintyö, 36 sivua, 4 liitesivua

Toukokuu 2018

Teknis-luonnontieteellinen koulutusohjelma

Pääaine: Teknillinen fysiikka

Tarkastajat: Prof. Tapio Rantala, Juha Tiihonen

Avainsanat: Kvanttipiste, soluautomaatti, QCA, looginen portti, polkuintegraali, Monte Carlo, PIMC

Kvanttipistesoluautomaatti (QCA) mahdollistaa uuden mikropiiriteknikan, jossa digitaalinen signaalinkäsittely pohjautuu kvanttipisteiden elektronimiehityksiin. QCA:ta on ehdotettu erääksi keinoksi kiertää niitä rajoja, joita nykyinen transistoritekniikka asettaa prosessorien suorituskyvylle. QCA:ta on kuitenkin tutkittu pääasiassa laskennallisilla simulaatioilla, sillä kokeelliset prototyypit ovat vielä rajoittuneita. Tässä kandidaatintyössä esitellään kvanttipistesoluautomaatin toimintaperiaate ja sillä rakennettavat yksinkertaiset loogiset portit. Työssä myös simuloidaan alkeellisia QCA-rakenteita, ja niiden toimintavarmuus määritellään signaalinvälityskyvyn perusteella. Simulaatiot suoritetaan polkuintegraali-Monte Carlo -menetelmällä (PIMC), jota verrataan yksinkertaiseen klassiseen miehitysmalliin. PIMC-menetelmän ja miehitysmallin tuottamat tulokset ovat melko yhtenevät, mikä viittaa siihen, että QCA:n toimintavarmuus on klassisesti approksimoitavissa. QCA-rakenteet saadaan toimimaan verrattain korkeissa lämpötiloissa, kun solun mitat asetetaan riittävän pieniksi. Tämän työn simulaatioissa solun koko on 2 nm ja kvanttipisteen säde 0.5 nm. Kuitenkin havaitaan, että lämpötila  $T = 300$  K on liian korkea täyden toimintavarmuuden saavuttamiseksi, sillä jokainen solu-solu kytkentä heikentää signaalia. NOT-portti havaitaan erityisen herkäksi termisen kohinan aiheuttamille häiriöille. Sekä AND- että OR-portti ilmentävät signaalien yhdistämisen keskeisen haasteen, joka esiintyy syötteen ollessa eri vahvuisia.

## ABSTRACT

**ALPI TOLVANEN:** Modeling quantum-dot cellular automata with path integral Monte Carlo method

Tampere University of Technology

Bachelor's thesis, 36 pages, 4 Appendix pages

May 2018

Bachelor of Science in Technology

Major: Advanced engineering physics

Examiner: Prof. Tapio Rantala, Juha Tiihonen

Keywords: Quantum-dot, cellular automata, QCA, logic gate, path integral, Monte Carlo, PIMC

Quantum-dot cellular automata (QCA) present a new technology for integrated circuits, in which the digital signal is processed by electron occupation of quantum dots. QCA is proposed as a means to overcome performance limitations that current transistor technology sets for processors. QCA is studied mostly by using computational simulations, as experimental prototypes are yet limited. This bachelor's thesis introduces the concept of QCA and a few logic gates that can be built. Simulations are carried out on simple QCA structures and their reliability is determined by signal transmission capability. Simulations are performed with path integral Monte Carlo (PIMC) method, which is compared to a simple classical electron occupation model. The PIMC method and the classical model yield almost similar results, which indicates that the reliability of QCA can be roughly estimated with classical methods. The simulation setup has a cell size 2 nm and a quantum-dot radius 0.5 nm. Because the sizes are chosen relatively small, the QCA structures are able to work in higher temperatures. However, temperature  $T = 300$  K is found to be too high for achieving full reliability, because the signal strength decreases between two adjacent cells. The logical NOT gate is found particularly prone to errors caused by thermal noise. Logical AND and OR gates illustrate a common challenge, which arises when two signals with different strengths are combined.

# Sisällys

<b>1. Johdanto</b>	<b>1</b>
<b>2. Kvanttipistesoluautomaatti (QCA)</b>	<b>3</b>
2.1 Kvanttipistemalli . . . . .	3
2.2 Kvanttipistesolu . . . . .	4
2.3 Solujen kytkentä . . . . .	5
2.3.1 Ajuri . . . . .	5
2.3.2 Viritystilat . . . . .	6
2.3.3 Polarisaaation vastefunktio . . . . .	7
2.3.4 Kulmittainen kytkentä . . . . .	9
2.4 QCA-järjestelmä . . . . .	9
2.5 Loogiset portit . . . . .	9
2.6 Termisen energian vaikutus . . . . .	11
2.7 Klassinen miehitysmalli . . . . .	12
<b>3. Polkuintegraali-Monte Carlo -menetelmä</b>	<b>14</b>
3.1 Hamiltonin operaattori . . . . .	14
3.2 Polkuintegraaliformalismi . . . . .	15
3.2.1 Kernel . . . . .	15
3.2.2 Tiheysmatriisi . . . . .	16
3.3 Monte Carlo -menetelmä . . . . .	19
3.4 Metropolis-algoritmi . . . . .	20
3.4.1 Näytteistäminen . . . . .	20
3.4.2 PIMC-menetelmän näytteistäminen . . . . .	21
3.5 PIMC-menetelmän ja klassisen miehitysmallin erot . . . . .	21
<b>4. Tulokset</b>	<b>23</b>
4.1 Kyljittäinen ja kulmittainen kytkentä . . . . .	24
4.2 AND- ja OR-portti . . . . .	26
4.3 Johdin ja NOT-portti . . . . .	29
<b>5. Yhteenveto</b>	<b>33</b>
<b>Lähteet</b>	<b>35</b>
<b>A. Ohjelmakoodit</b>	<b>37</b>
<b>B. Kvanttipisteen potentiaali</b>	<b>38</b>

## LYHENTEET JA MERKINNÄT

CMOS	Complementary metal oxide semiconductor, yleinen kanavatransistorityyppi mikropiiriteknikassa
MOSFET	Metal-oxide-semiconductor field-effect transistor (Metallioksidi-puolijohdekanavatransistori)
PIMC	Path integral Monte Carlo (polkuintegraali-Monte Carlo -menetelmä)
QCA	Quantum dot cellular automata (kvanttipistesoluautomaatti)
QD	Quantum dot (kvanttipiste)
$\beta$	Käänteinen lämpötila $\frac{1}{k_B T}$
$E$	Energia
$e$	Alkeisvaraus $\approx 1.602 \times 10^{-19} \text{C}$
$\varepsilon$	Aineen permittiivisyys
$\hat{H}$	Hamiltonin operaattori
$\hbar$	Redusoitu Planckin vakio
$K$	Kernel
$k$	Coulombin vakio $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$
$k_B$	Boltzmannin vakio
$L$	Lagrangen funktio
$M$	Trotterin luku
$m$	Massa
$\nabla_i$	Gradienttioperaattori
$P$	Solun polarisaatio
$\mathcal{P}$	Todennäköisyys
$\psi$	Ominaisfunktio
$q$	Varaus
$q_I$	Ajurin kvanttipisteen varaus
$R$	Monen hiukkasen konfiguraatio
$R_{\text{QD}}$	Kvanttipisteen säde
$r$	Varausten keskipisteiden etäisyys toisistaan
$\vec{r}$	Yhden hiukkasen paikkakoordinaatti
$S$	Liikkeen <i>action</i>
$T$	Lämpötila; kineettinen energia
Tr	Matriisin jälki
$t$	Aika
$\tau$	Imaginaariajan lyhyt aika-askel
$V$	Potentiaalienergia

# 1. JOHDANTO

Mikropiirien miniaturisaatio ja Mooren laki ovat keskeisesti vaikuttaneet viime vuosikymmenien teknologian kehitykseen. On pitkään arvioitu, että prosessorien transistorit ja johtimet saavuttavat lopulta minimikokonsa, kun haasteiksi nousevat hukkalämmön tuotto, johtimien kapasitanssi ja elektronien tunneleutuminen [1][2]. Nykyiselle CMOS-tekniikalle (Complementary Metal Oxide Semiconductor) etsitään aktiivisesti uusia vaihtoehtoja, joista kvanttipistesoluautomaatti eli QCA (Quantum-dot Cellular Automata) on eräs esitetty tekniikka. Binäärisen informaation esitystapa eroaa merkittävästi CMOS- ja QCA-tekniikoissa. CMOS-tekniikassa bitti muodostetaan sähköisen potentiaalin avulla, ja sen loogiset portit toteutetaan MOSFET-transistoreilla (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor). Vastaavasti QCA-tekniikan bitin tilan määrittää kvanttipistesolun elektronijärjestys, ja sen loogiset portit toteutetaan soluautomaateilla.

C.S. Lent *et al.* esittelivät kvanttipisteautomaatit vuonna 1993 [3]. Tekniikkaa on tutkittu enimmäkseen laskennallisesti, mutta myös joitakin kokeita on kyetty suorittamaan [1]. QCA:ta ei tule sekoittaa kvanttietokoneisiin, sillä toisin kuin kubitti, on QCA:n bitin arvo yksikäsitteinen. QCA-tekniikan lupaavimpia piirteitä ovat hyvin alhainen hukkalämmön tuotto sekä mahdollisuudet korkeisiin kellotaajuuksiin.

Kvanttipiste on sähköisesti varautunut keinotekoinen rakenne, joka kykenee sitomaan yksittäisiä elektroneja. QCA:n kvanttipiste voi sitoa vain yhden ylimääräisen elektronin, jolloin se esiintyy kahdessa tilassa: se joko sisältää elektronin tai sitten ei. Elektronit voivat ohjatusti järjestyä kvanttipisteissä eri asetelmiin, mikä mahdollistaa informaation esityksen ja käsittelyn. Elektronien siirtyminen on rajoittunut pääasiassa lokaaliin tunneleutumisilmiöön, ja signaali kulkee ilman CMOS-tekniikalle ominaista virtausvastusta, mikä vähentää hukkalämmöntuottoa [4].

QCA:n elektronien etäisyydet ja ohjausenergiat ovat pieniä, mikä asettaa ehtoja simulointimenetelmien soveltavuudelle. Huomioon on otettava kvanttiliöiden lisäksi myös äärellinen lämpötila, johon harva elektronirakenteen laskumenetelmä kunnolla soveltuu. Bistabiilin solun elektronikorrelaatio tuottaa myös usein haasteita iteratiivisilla ja keskiarvokenttään perustuvilla menetelmillä tutkittaessa [5].

Tässä työssä QCA:n simulointiongelmää lähestytään polkuintegraali-Monte Carlo -menetelmällä (path integral Monte Carlo, PIMC) [6], joka kykenee ottamaan huomioon kaikki tarvittavat kvantti-ilmiöt sekä äärellisen lämpötilan. Menetelmä simuloi systeemin termistä tasapainotilaa, jota voidaan käyttää suoraan QCA:n toimintavarmuuden arvioinnissa. Menetelmä ei kuitenkaan sovellu reaaliaikaisten prosessien tai epätasapainotilojen kuvaamiseen, minkä takia QCA-systeemien dynamiikkaa ei työssä tarkastella.

Tämän kandidaatintyön tarkoituksena on esitellä QCA ja sen keskeiset toiminnan haasteet korkeassa lämpötilassa ( $T = 300$  K). Samalla pyritään näyttämään, kuinka PIMC-menetelmä soveltuu QCA:n mallintamiseen, ja kuinka se tarjoaa tehokkaat työkalut termisten ilmiöiden tarkasteluun. Laskennalliset tulokset valaisevat menetelmien käytettävyyttä ja tarjoavat suuntaviivoja, joita voidaan mahdollisesti hyödyntää kokeellisten prototyyppien suunnittelussa. Työ myös toistaa ja jatkaa aiheesta aiemmin tehtyä tutkimusta [5].

Luvussa 2 esitellään QCA:n rakenne ja sen kyky käsitellä binääristä informaatiota. Samalla esitellään klassinen miehitysmalli ja käsitellään termisten viritysten aiheuttamia toimintahäiriöitä. Luvussa 3 esitellään lyhyesti PIMC-menetelmä ja sen taustalla oleva polkuintegraaliformalismi. Luvussa 4 simuloidaan kuutta alkeellista QCA-rakennetta käyttäen sekä PIMC-menetelmää että klassista miehitysmallia. Tulosten pohjalta arvioidaan rakenteen toimintakykyä ja esitetään siihen eniten vaikuttavia tekijöitä.

## 2. KVANTTIPISTESOLUAUTOMAATTI (QCA)

Soluautomaatti on John von Neumannin kehittämä idea diskreetistä mallista, jossa soluista koostuvan järjestelmän tila muuttuu askelittain. Systemin tila tietyllä ajanhetkellä määrää täysin uuden tilan seuraavalla ajanhetkellä. Yksittäisen solun uusi tila lasketaan käyttämällä solun ja muiden siihen kytkettyjen solujen tiloja [7, s. 5]. Tunnetuin esimerkki tästä on John Conwayn Game of Life, jolla voidaan toteuttaa muun muassa universaali Turingin kone [7] ja siten prosessori.

Tässä luvussa esitellään kvanttipistesoluautomaatti ja sen toimintaperiaate. Aluksi esitellään yksittäinen kvanttipiste ja kvanttipistesolu. Seuraavaksi tarkastellaan kahden vierekkäisen solun kytkentää ja digitaalisen signaalin välittymistä. Sitten esitellään QCA-systeemillä toteutetut loogiset portit NOT, AND ja OR. Lopuksi tarkastellaan klassisen miehitysmallin avulla, kuinka terminen energia häiritsee systeemin toimintavarmuutta.

### 2.1 Kvanttipistemalli

Kvanttipiste on alustaan kiinnitetty paikallisesti varautunut alue, joka on toteutustavasta riippuen esimerkiksi metalliklusteri, puolijohdenanorakenne tai molekyyli [8, s. 18]. Tässä työssä pyritään simuloimaan QCA-systeemiä, joka koostuu yksinkertaisista kolloidisista kvanttipisteistä. Kvanttipisteen mallina toimii tasaisesti varautunut pallo, jonka nettovaraus on puolikas alkeisvaraus  $q_{\text{QD}} = +\frac{1}{2}e$  ja säde  $R_{\text{QD}} = 0.5 \text{ nm}$ . Kun kvanttipiste sisältää yhden elektronin, on sen kokonaisvaraus ulospäin  $-\frac{1}{2}e$ . Tulee huomata, että puolikkaan alkeisvarauksen toteuttaminen on käytännössä ongelmallista [9], mutta se kuitenkin yksinkertaistaa symmetrisesti varautuneen solun mallia.

Kvanttipisteen ja elektronin sähköinen potentiaali on ilmaistavissa muodossa

$$V_{\text{QD}}(r) = \begin{cases} -\frac{k}{\varepsilon_r} q_{\text{QD}} e \left(\frac{1}{r}\right) & \text{kun } r \geq R_{\text{QD}} \\ -\frac{k}{\varepsilon_r} q_{\text{QD}} e \left(3 - \frac{r^2}{(R_{\text{QD}})^2}\right) & \text{kun } r < R_{\text{QD}}, \end{cases} \quad (2.1)$$



missä  $r$  on elektronin ja kvanttipisteen keskikohdan välinen etäisyys,  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$  on Coulombin vakio ja  $\epsilon_r$  väliaineen suhteellinen permittiivisyys. Kaavan johto on liitteessä B. Kun elektroni on kvanttipisteen ulkopuolella, kohdistuu siihen coulombinen potentiaali, joka on verrannollinen tekijään  $-\frac{1}{r}$ . Kvanttipisteen sisäpuolella elektroniin kohdistuu harmoninen potentiaali, mikä vastaa usein hyvää approksimaatiota [10].

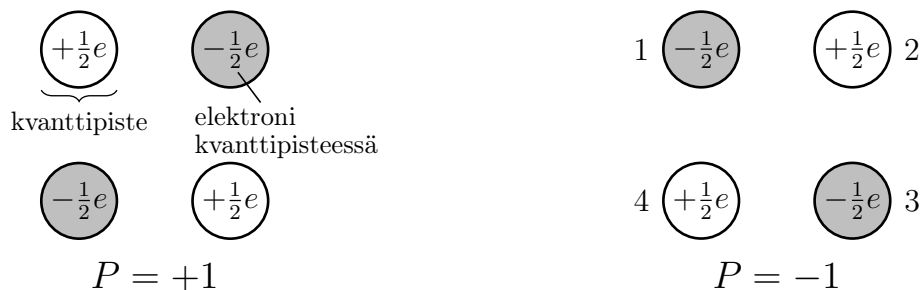
Mallin kvanttipiste sijaitsee homogeenisessa ja neutraalissa väliaineessa, jonka suhteellinen permittiivisyys valitaan selkeyden vuoksi arvoon  $\epsilon_r = 1$ . Käytännössä todellisilla väliaineilla on tätä korkeampi permittiivisyys, mikä laskee potentiaalinvaimakkuutta ja heikentää samalla QCA:n toimintaa. Kvanttipistemalli yliarvioi QCA:n toimintakykyä, mutta se ei ole kriittistä, sillä vaikutusta voi muun muassa kumota skaalaamalla lämpötilaa.

## 2.2 Kvanttipistesolu

Kvanttipistesolu koostuu neljästä identtisestä kvanttipisteestä, jotka sijaitsevat neliömuodostelmassa. Varaustasapainon vuoksi soluun asettuu 2 elektronia, jotka voivat tunneloitua kvanttipisteestä toiseen. Nämä elektronit hylkivät toisiaan Coulombin vuorovaikutuksen vuoksi, ja siten ne pyrkivät sijaitsemaan solun vastakkaisissa kulmissa. Alhaisimmassa energiatilassa eli *perustilassa* elektronit voivat sijaita solun vastakkaisissa kulmissa kahdella eri tavalla, joita kutsutaan solun *polarisaatioiksi*. Tässä työssä polarisaation tilat valitaan kuvien 2.1 ja 2.2 mukaisesti  $+1$  ja  $-1$ , jotka vastaavat loogisia totuusarvoja 1 ja 0 [1].

Määritellään solun polarisaatio kaavalla [3][1]

$$P = \frac{p_1 + p_3 - p_2 - p_4}{p_1 + p_3 + p_2 + p_4} \in [-1, 1], \quad (2.2)$$



**Kuva 2.1** Kvanttipistesolu, jonka kaksi elektronia muodostavat polarisaation tilan  $P = +1$ , joka vastaa bitin arvoa 1.

**Kuva 2.2** Solun toinen mahdollinen polarisaatio  $P = -1$ , joka vastaa bitin arvoa 0. Kvanttipisteet on indeksoitu.

missä  $p_i$  on elektronien kokonaisvaraus kvanttipisteen  $i$  alueella, ja indeksointi on kuvan 2.2 mukainen. Jos elektronit sijaitsevat solun saman kyljen kvanttipisteissä, on määritelmän polarisaatio 0, joka ei vastaa loogista totuusarvoa.

Kun solun kvanttipisteet sijaitsevat tarpeeksi lähellä toisiaan, voi elektroni tunne-  
loitua kvanttipisteestä toiseen, mikä on polarisaation kääntymisen edellytys [1]. Jos kvanttipisteiden välistä potentiaalivallia nostetaan esimerkiksi sähkökentällä, laskee elektronien tunneloitumistodennäköisyys, mikä rajoittaa polarisaation kääntymistä. Tätä hyödynnetään systeemien *kellotuksessa*, joka lukitsee ja vapauttaa solut sykli-  
tässä aaltorintamassa. Kellotusta käytetään laajoissa QCA-systeemeissä, ja sillä muun muassa kontrolloidaan signaalien kulkusuuntaa ja tarkkaa ajoitusta [8][11]. Koska kellotus on dynaaminen prosessi, ei sitä tässä työssä tarkastella.

Kahdesti degeneroituneen perustilan molemmat polarisaatiot ovat termodynaami-  
sesti yhtä todennäköisiä, eikä yksittäinen solu siten pysy kummassakaan polarisaa-  
tiossa, vaan vaihtelee niiden välillä. Kuitenkin jos kaksi solua ovat vierekkäin, ja ensimmäinen niistä on polarisoitunut, hajoaa toisen solun degeneraatio kahdeksi eri energiatilaksi.

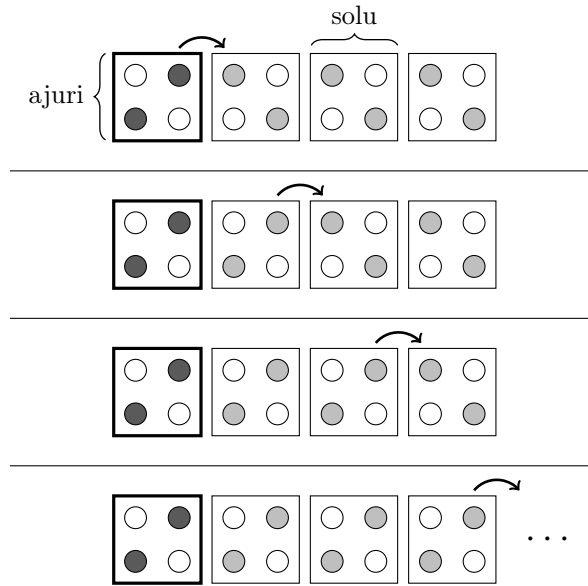
## 2.3 Solujen kytkentä

Kahta vierekkäistä solua kutsutaan *kytketyiksi*, kun niiden polarisaation tilat vuoro-  
vaikuttavat keskenään sähköisen vuorovaikutuksen ansiosta. Polarisoitunut solu kohdistaa sen viereisen solun polarisaatiotilojen välille energiaeron  $\Delta E$ . Energia mi-  
nimoituu, kun solujen polarisaatiot asettuvat toistensa suhteen kytkennän määrää-  
mästi. Esimerkiksi kyljittäin kytketyt solut pyrkivät kääntymään polarisaatioiltaan samansuuntaisiksi.

### 2.3.1 Ajuri

*Ajuri* kutsutaan sellaista solua, jonka polarisaatio voidaan asettaa ja pitää halu-  
tussa tilassa. Kun ajuriin kytketään tavallinen solu, kääntyy solu ajurin ohjaamaan polarisaatioon. Jos kääntynyt solu on edelleen kytketty muihin soluihin, kääntyvät ne samalla periaatteella, jolloin ajurin polarisaatio etenee ketjureaktion tavoin. Ku-  
vassa 2.3 havainnollistetaan ajurin ohjaamaa solujonoa. Nimitetään ketjureaktiona välittyntä tilaa *signaaliksi*.

QCA-tekniikka siirtää binääristä informaatiota kvanttipistesoluista koostuvilla jo-  
noilla. Koska solujonon suuntaisesti ei kulje sähkövirta, ei myöskään resistiivinen



**Kuva 2.3** Ajuri järjestää solujonon solut samaan polarisaatioon, ja välittää siten signaalin.

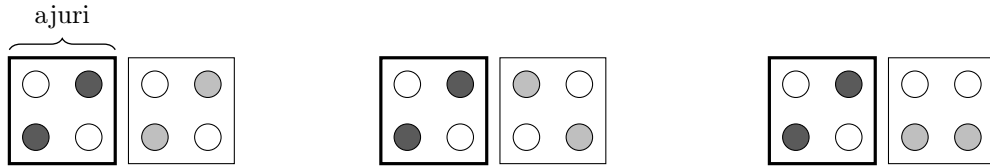
virtausvastus aiheuta energiahäviöitä. Myös Boolean logiikan prosessointi on mahdollista, ja sitä käsitellään luvussa myöhemmin.

Tämän työn ajuria mallinnetaan neljällä kiinteästi varatulla kvanttipisteellä. Ajurin lukittu polarisaatio  $P = +1$  muodostetaan asettamalla indeksien 1, 3 kvanttipisteiden varauksiksi  $q_I = +\frac{1}{2}e$  ja indeksien 2, 4 varauksiksi  $-q_I$ . Vastaavasti käänteinen polarisaatio  $P = -1$  muodostetaan vaihtamalla varausten etumerkit. Mallin ajuri simuloi solun lukittua elektronimiehitystä ja se syöttää systeemille sisääntulosignaalin. Kvanttipisteiden varausjakauman suoraa ohjaamista on myös tutkittu ajasta riippuvilla menetelmillä [10].

### 2.3.2 Viritystilat

Korkeissa lämpötiloissa terminen energia voi olla tarpeeksi suuri poikkeuttamaan solun perustilalta *viritystilalle*, jolloin kytkettyjen solujen polarisaatiot ovat hetkelisesti kytkennän ohjaaman suunnan vastaisesti. Jotta terminen hilavärähtelyenergia ei häiritsisi kytkentää, on sen oltava huomattavasti tilojen välistä energiaeroa alhaisempi, eli  $k_B T \ll \Delta E$  [3].

Solun elektronimiehityksessä esiintyy kahden tyyppisiä viritystiloja. Ensimmäinen viritys on se, että solu kääntyy vasten ulkoista ohjauspolarisaatiota. Annetaan tälle nimitys *käännösviritys* ("flip"). Toinen mahdollinen viritystilan tyyppi on se, että elektronit siirtyvät vastakkaista kulmista viereisiin kulmiin [5], jota nimitetään nyt



**Kuva 2.4** Perustila  $E_0$ ,  $P = +1$

**Kuva 2.5** Käännösviritys  $E_k$ ,  $P = -1$

**Kuva 2.6** Esimerkki rinnakkaisvirityksestä  $E_r$ ,  $P = 0$

rinnakkaisviritykseksi ("leap"). Kahden solun kytkennän perustila, sekä käännös- ja rinnakkaisviritystilaa on esitetty kuvissa 2.4, 2.5 ja 2.6. Kuvia vastaava energiatilojen järjestys on  $E_0 < E_k \ll E_r$ . Alhaisemman energiatilan johdosta käännösviritys on huomattavasti yleisempi kuin rinnakkaisviritys. Käytetään termiä "QCA-järjestelmän viritystilaa" sellaisesta järjestelmän tilasta, jossa sen yksi tai useampi solu on virittynyt. Viritystilaa-termillä viitataan aina kvanttipisteiden elektronimiehityksiin, eikä sillä tarkoiteta elektronin kvanttiutuneita energiatiloja. Huomio siis kiinnitetään elektronien sijainteihin eikä niiden kineettisiin energioihin.

Solulla on neljä eri rinnakkaisviritystilaa, joilla jokaisella solun polarisaatio on 0. Koska  $P = 0$  ei vastaa kumpaakaan sovittua bitin arvoa, pyritään solujen suunnittelulla välttämään rinnakkaisviritykset [3]. Rinnakkaisvirityksiä voidaan pyrkiä vähentämään pienentämällä solun ja kvanttipisteiden kokoa [5].

Digitaalisen signaalinkäsittelyn kannalta on tärkeää, että signaali esittää aina yksikäsitteistä bittiä. Ideaalisesta solusta mitatun polarisaation tilan tulisi siis olla joko  $+1$  tai  $-1$ . Kuitenkin käytännössä kaavan 2.2 polarisaatio kuuluu välille  $P \in [-1, 1]$  kahdesta eri syystä. Ensimmäisenä syynä on edellä mainittu rinnakkaisviritys, ja toisena syynä on työssä käytetty tulkinta, joka määrittelee polarisaation termisen keskiarvon  $\langle P \rangle$  avulla. Termillä "terminen keskiarvo" viitataan suureen odotusarvoon silloin, kun systeemi on termisessä tasapainotilassa [12, s. 229]. Kun lämpötila on äärellinen, voi terminen kohina hetkellisesti aiheuttaa solun käännös- tai rinnakkaisvirityksiä, jolloin polarisaation arvo on muuttunut. Viritykset heikentävät polarisaation termistä keskiarvoa, jolloin se asettuu ääriarvojen  $+1$  ja  $-1$  välille. Kun systeemin suureen mittaukseen käytetty aika on tarpeeksi pitkä, vastaa mittaustulos termistä keskiarvoa.

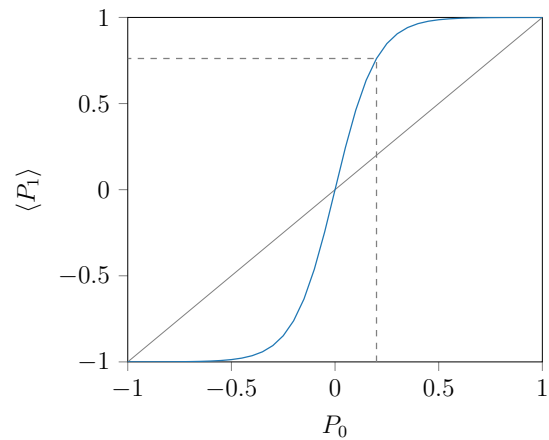
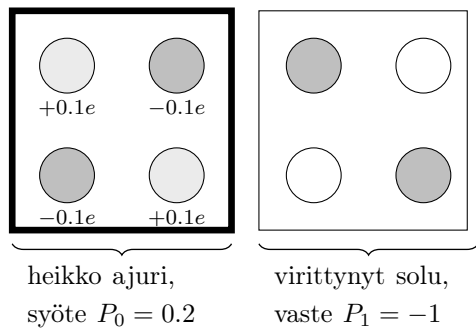
### 2.3.3 Polarisaation vastefunktio

Solukytken toimivuutta arvioidaan laskemalla solun vastepolarisaatio  $\langle P_1 \rangle$  ajurin syötepolarisaation  $P_0$  funktiona. Kyseessä on siis syötteen ja vasteen yksinkertainen herkkyysanalyysi. Ajurin syötepolarisaatio välillä  $P_0 \in [-1, +1]$  muodostetaan

skaalaamalla sen kvanttipisteiden varauksia  $q_I$  välillä  $[-\frac{\epsilon}{2}, +\frac{\epsilon}{2}]$ . Skaalautus on lineaarinen:  $P_0 = 2q_I$ . Kun ajuri on heikosti polarisoitunut, eli  $|P_0| \ll 1$  ja  $|q_I| \ll \frac{\epsilon}{2}$ , ohjaa se myös vastesolua heikosti aiheuttaen tämän polarisaatioiden välille vain pienen energiaeron. Kun kynnyks nousee energeettisestä perustilasta on pieni, voi terminen energia todennäköisemmin virittää vastesolun vastakkaiseen polarisaatioon.

Kuvassa 2.7 havainnollistetaan heikkoa ajuria ja virittyntä solua. Vastaavasti kuva 2.8 esittää polarisaation vastefunktion tyypillistä muotoa, jossa heikon syötteen  $P_0$  vaste  $\langle P_1 \rangle$  vahvistuu kohti ääriarvoja. Vastefunktion epälineaarisuus on kriittinen ehto QCA:n toiminnalle, sillä muuten signaali heikkenisi jokaisen solukytkennän matkalla.

Ajurin heikolla polarisaatiolla mallinnetaan heikentyntä sisääntulosignaalia, ja huomioon on otettava sen ero keskiarvoisesti heikentyneeseen signaaliin. Syötepolarisaatio  $P_0$  on kiinnitetty arvoonsa varausjakauman avulla, mutta vastepolarisaatio  $\langle P_1 \rangle$  on terminen odotusarvo. Esimerkiksi syötteen arvo  $P_0 = 0.2$  vastaa sitä, että ajurin kvanttipisteiden efektiiviset varaukset ovat  $\pm q_I = \pm 0.1e$ . Jos rinnakkaisvirityksiä ei oleteta esiintyvän, arvo  $\langle P_1 \rangle = 0.75$  vastaa sitä, että vastesolu on 87.5% ajasta polarisaatiossa  $+1$  ja muulloin polarisaatiossa  $-1$ .

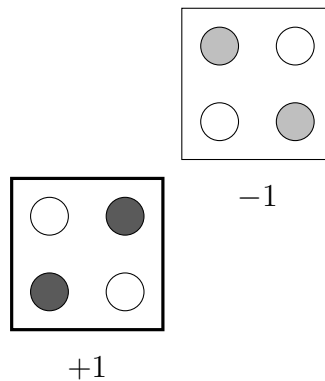


**Kuva 2.7** Heikon ajurin ja solun kytkentä yksittäisellä ajanhetkellä. Ajurin heikko syötepolarisaatio  $P_0 = 0.2$  muodostetaan laskemalla sen kvanttipisteiden varaukset arvoihin  $\pm q_I = \pm 0.1e$ . Vastesolu on kuvassa hetkellisesti virittyneessä tilassa, sillä terminen kohina on ylittänyt ajurin ohjausenergiaa.

**Kuva 2.8** Solukytkennän polarisaation epälineaarinen vastefunktio. Alhaisen syötepolarisaation  $P_0 = 0.2$  vaste vahvistuu arvoon  $\langle P_1 \rangle = 0.75$ . Diagonaalinen viiva kuvaa lineaarista vastetta, joka on QCA:n toiminnalle ehdoton alaraja. Havainnekuva, ei mitattu tulos.

### 2.3.4 Kulmittainen kytkentä

Loogisen bitin negaatio muodostetaan NOT-portilla. QCA-rakenteissa signaalin polarisaatio voidaan kääntää kuvan 2.9 kulmittaisella kytkennällä, jonka perustilassa solujen polarisaatiota ovat vastakkaiset. Koska kulmittain kytketyt solut ovat kauempana toisistaan kuin kyljittäin kytketyt, on solujen välinen vuorovaikutus heikompi, ja siten vastakkaisten polarisaatioiden välinen energiaero on alhaisempi. Alhaisen energiaeron seurauksena on kulmittainen kytkentä herkkä termisen energian häiriöille.



*Kuva 2.9 Kulmittainen kytkentä vaihtaa polarisaation suunnan.*

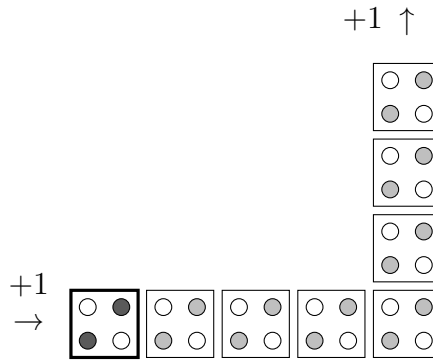
## 2.4 QCA-järjestelmä

QCA järjestelmä koostuu useista toisiinsa kytketyistä soluista. Solun tilaan vaikuttaa vain sen viereiset kytkennät, sillä yhtä solunmittaa etäisempien solujen vuorovaikutus on pieni. Vaikutuksen lyhyt kantama johtuu siitä, että solujen kvadrupolimomenttien välinen vuorovaikutus vaimenee käänteisesti etäisyyden viidennessä potenssissa [8]. Solut pyritään silti pitämään tarpeeksi etäällä toisistaan siten, ettei elektronien tunnelloitumista tapahdu solusta toiseen [1].

QCA-järjestelmä välittää signaalin asettumalla syötteiden ohjaamaan perustilaan [1]. Kun ajureilla syötetään uusi sisääntulosignaali, ei perustila asetu välittömästi, vaan järjestelmä on hetken epästabiilissa tilassa [3]. Työn simuloinneissa oletetaan, että tasapainon asettumiseen on kulunut rajaton aika, vaikka se ei välttämättä täysin päde kelloitettuihin systeemeihin.

## 2.5 Loogiset portit

Tämän työn QCA-järjestelmät koostuvat kyljittäin ja kulmittain kytketyistä soluista. Solut on sijoitettu tasaväliseen ruudukkoasetelmaan, jossa solujen välinen etäisyys on suurempi kuin solun kvanttipisteiden etäisyys.

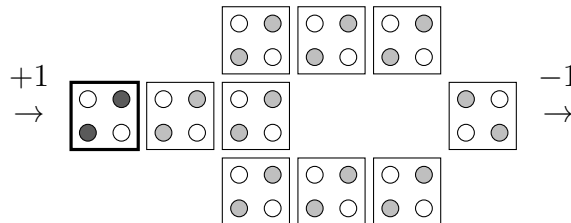


**Kuva 2.10** Signaalinjohtimeen voidaan muodostaa 90° kulma.

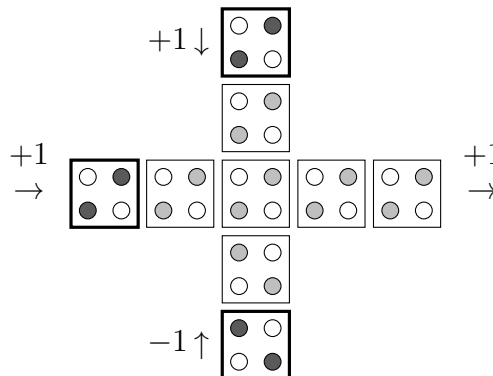
Signaalin informaatio on siirrettävissä suorien solujonojen avulla, kuten aiemmin kuvassa 2.3 esitetään. Suoria solujonoja voidaan myös yhdistää toisiinsa 90° kulmissa. Kuvassa 2.10 on esimerkki eräästä kulman omaavasta signaalinjohtimesta.

Kulmittainen kytkentä toimii jo sellaisenaan NOT-porttina aiemmassa kuvassa 2.9, mutta se varsin herkkä termisille häiriöille. Siksi portin rakennetta yleensä parannelaan kuvan 2.11 tavoin, jossa kaksi rinnakkaista kulmittaiskytkentää laskee käännösvirityksen todennäköisyyttä.

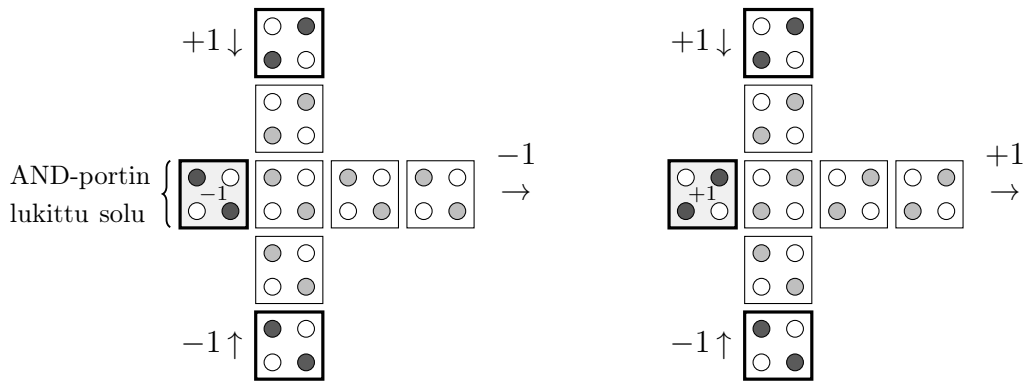
Enemmistöportissa yhdistyy kolme eri QCA-signaalia, joista yleisin päätyy ulostuloksi. Eli syötteiden ollessa +1, +1 ja -1 antaa portti ulos enemmistön määräämän signaalin +1, mikä on esitetty kuvassa 2.12



**Kuva 2.11** NOT-portti kääntää signaalin polarisaation.



**Kuva 2.12** Enemmistöportti valitsee kolmesta sisääntulopolarisaatiosta yleisemmän.



**Kuva 2.13** AND-portti laskutoimituksella  
 $AND(+1, -1) = -1$

**Kuva 2.14** OR-portti laskutoimituksella  
 $OR(+1, -1) = +1$

Enemmistöportin avulla on rakennettavissa AND- tai OR-portti siten, että yhden syötesignaali kiinnitetään vastaavasti arvoon  $-1$  tai  $+1$ . Enemmistöportin kaksi muuta sisääntuloa jäävät porttien käyttöön. Kuvissa 2.13 ja 2.14 on esitetty AND- ja OR-porttien toteutukset sisääntulosignaaleilla  $+1$  ja  $-1$ .

Pelkästään portteja NOT ja AND yhdistelemällä on muodostettavissa mielivaltainen looginen totuustaulu [13]. Totuustaulu voi vastata esimerkiksi kahden binääriluvun laskutoimitusta. Useat digitaalitekniikan keskeiset rakenteet, kuten summain ja kertolaskupiiri, muodostuvat loogisista porteista [14]. Tyypillisimmille piireille on suunniteltu QCA-vastineet [8], ja niiden toimintaa on arvioitu laskennallisilla menetelmillä [4][15, ss. 239–254].

## 2.6 Termisen energian vaikutus

Tässä työssä tutkitaan vain termisen tasapainotilan saavuttaneita QCA-systeemejä, jolloin hiukkasilla keskimäärin energia  $\frac{1}{2}k_B T$  jokaista vapausastetta kohden [12, s. 14]. Atomirakenteen hilavärähtely aiheuttaa elektroneihin vaihtelevan suuruisia häiriöitä, mutta niiden keskimääräisen suuruusluokan arvioinnissa voidaan käyttää termiä  $k_B T$ .

QCA-järjestelmä käsittelee signaalin oikein vain perustilallaan, eikä signaalin oikeellisuutta voida taata viritystiloina. Merkitään systeemin perustilan  $E_0$  ja ensimmäisen virittyneen tilan  $E_1$  energiaeroa

$$\Delta E = E_1 - E_0. \quad (2.3)$$

Jos  $E_1$  on käänköviritys, voidaan energiaerosta  $\Delta E$  käyttää myös termiä *kink*-energia [4]. Kun  $\Delta E \gg k_B T$ , on systeemin perustila huomattavan todennäköinen,



sillä terminen energia kykenee vain harvoin ylittämään viritykseen vaadittavan energiarajan. Energiatilan  $E_k$  todennäköisyys ilmenee selvemmin Boltzmannin kertoi-  
men avulla

$$\mathcal{P}(E_k) = \frac{e^{-\frac{E_k}{k_B T}}}{Z}, \quad (2.4)$$

missä partitiofunktio

$$Z = \sum_k e^{-\frac{E_k}{k_B T}} \quad (2.5)$$

on summa yli kaikkien mahdollisten tilojen  $k$  [16, s. 269][12, s. 251]. Partitiofunk-  
tio normittaa kokonaistodennäköisyyden  $\sum_k \mathcal{P}(E_k)$  arvoon 1. On ilmeistä, että kun  $\Delta E \gg k_B T$ , niin  $e^{-\frac{E_0}{k_B T}} \gg e^{-\frac{E_1}{k_B T}}$ , mistä taas seuraa, että  $\mathcal{P}(E_0) \gg \mathcal{P}(E_1)$ . Kuit-  
tenkaan QCA-systeemin luotettavuutta ei taata pelkästään sillä, että perustila on huomattavasti ensimmäistä viritystilaa todennäköisempi. Toimintavarmuuteen vaa-  
ditaan myös se, että perustilan todennäköisyys on lähes 1, eli  $\mathcal{P}(E_0) \approx 1$ , jolloin viritystilojen kokonaisuudeksi jää  $\sum_{k>0} \mathcal{P}(E_k) \approx 0$ .

Kun solujen lukumäärä  $N$  kasvaa yhtenäisessä QCA-järjestelmässä, nousee samalla termisten viritysten todennäköisyys. Lent arvioi entropian avulla suuren systeemin toiminnalle ehdon [4]

$$\frac{k_B T}{\Delta E} \ln(N) \ll 1, \quad (2.6)$$

mikä asettaa solujen määrälle ylärajan. Käytännön näkökulmasta  $\ln(N)$  kasvaa hi-  
taasti, jolloin systeemin koko ei aseta kovin suurta lisähaastetta [1][4].

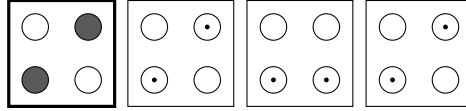
## 2.7 Klassinen miehitysmalli

Esitellään nyt yksinkertainen elektronimiehitysmalli, joka laskee kokonaisenergian käyttäen klassista fysiikkaa. Mallissa oletetaan, että pistemäiset elektronit ovat liik-  
kumatta koordinaateissaan  $\vec{r}_i$ . Tällöin kineettinen energia on nolla, ja kokonaisener-  
giaksi saadaan parivuorovaikutusten summa

$$E = \sum_{i,j} V_{\text{QD}}(r_{i,j}) + \sum_{i<i'} \frac{k e^2}{\epsilon_r r_{i,i'}}, \quad (2.7)$$

missä indeksi  $i$  vastaa elektronia ja indeksi  $j$  kvanttipistettä,  $r$  on varausten etäisyys, ja  $V_{\text{QD}}$  on kvanttipisteen potentiaali kaavasta 2.1.

Olkoon QCA-systeemissä ajuri ja  $N$  solua, jolloin siinä on yhteensä  $2N$  elektro-  
nia. Miehitysmalli rajoittaa energiatiilojen lukumäärän alhaiseksi tekemällä seuraa-  
vat keskeiset oletukset: Elektronit voivat sijaita vain kvanttipisteiden keskipisteissä, ja yksittäinen solu sisältää aina kaksi elektronia erillisissä kvanttipisteissä. Kvant-



**Kuva 2.15** Klassinen miehitysmalli tekee oletuksen, että elektronit sijaitsevat ainoastaan kvanttipisteiden keskipisteissä. Kuvan systeemi on rinnakkaisvirittyneessä tilassa.

tipsteen koko ei kohdista vaikutusta keskipisteessä sijaitsevaan elektroniin, jolloin kvanttipisteet käyttäytyvät mallissa kuin pistevaraukset.

Miehitysmallin solu voi esiintyä 6:ssa eri tilassa, joita ovat polarisaatiot  $+1$ ,  $-1$ , ja neljä polarisaation  $P = 0$  rinnakkaisviritystilaa. Systeemin tilojen lukumääräksi tulee  $6^N$ . Jos rinnakkaisviritykset oletetaan harvinaisiksi, voidaan rajoittua vain polarisaatioihin  $P = \pm 1$ , jolloin tilat vähenevät lukumäärään  $2^N$ . Kuvassa 2.15 esitetään esimerkki klassisen miehitysmallin systeemistä, joka on rinnakkaisvirittynyt.

Tuntemalla kaikki energiatilat voidaan tilan todennäköisyys laskea kaavasta 2.4. Miehitysmalli laskee partitiofunktioon jokaisen mahdollisen tilan, ja siten sen laskennalliset vaatimukset kasvavat voimakkaasti solulukumäärän kasvaessa.

Kun tunnetaan systeemin tilojen esiintymistodennäköisyys, on terminen keskiarvo  $\langle P \rangle$  laskettavissa polarisaatioiden  $+1, 0$  ja  $-1$  odotusarvona

$$\langle P \rangle = \sum_{i=-1}^{+1} P_i \mathcal{P}(P = P_i) \quad (2.8)$$

$$= (+1) \cdot \mathcal{P}(P = +1) + (0) \cdot \mathcal{P}(P = 0) + (-1) \cdot \mathcal{P}(P = -1) \quad (2.9)$$

$$= (+1) \cdot \frac{1}{Z} \sum \exp\left\{-\frac{E_{+1}}{k_B T}\right\} + (-1) \cdot \frac{1}{Z} \sum \exp\left\{-\frac{E_{-1}}{k_B T}\right\}, \quad (2.10)$$

missä rivin 2.10 ensimmäinen summa on yli kaikkien niiden systeemin tilojen, joissa solu on polarisaatiossa  $+1$ . Vastaavasti rivin 2.10 jälkimmäinen summa on yli polarisaation  $-1$  tilojen. Partitiofunktioon  $Z$  on sisällytetty kaikki miehitysmallin tilat.

Koska elektronien oletetaan sijaitsevan vain kvanttipisteiden keskipisteissä, rajaa miehitysmalli pois lukuisia mahdollisia energiatiloja. Oletus toimii silloin, jos viritystilojen väliset energiaerot ovat merkittävästi suurempia kuin mitkään muut ilmiöt. Kuitenkaan lähtöoletuksista aiheutuvaa virhettä ei kyetä kovin helposti arvioimaan mallista itsestä käsin. Miehitysmallin soveltuvuudesta saadaan viitteitä kun sitä verrataan tarkkoihin kvanttimekaanisiin PIMC-laskuihin. Klassinen miehitysmalli toteutetaan liitteen A Python-ohjelmalla.

### 3. POLKUINTEGRAALI-MONTE CARLO -MENETELMÄ

Polkuintegraaliformalismi on Richard Feynmanin esittämä vaihtoehtoinen muotoilu Schrödingerin kvanttimekaniikalle. Vaikka Schrödingerin aaltoyhtälöiden postulointi ja ratkaiseminen on yleisempi menetelmä, tarjoaa polkuintegraalimuotoilu omat vahvuutensa [17]. Polkuintegraalit ovat laskennallisesti melko raskaita, ja siten approksimaatioiden ja numeeristen menetelmien hyödyntäminen on keskeistä ratkaisuisissa. Tietokoneiden laskentatehon kasvu on avannut mahdollisuuden polkuintegraali-Monte Carlo (path integral Monte Carlo, PIMC) -menetelmälle, jonka avulla voidaan tarkastella systeemiä sen termodynaamisessa tasapainotilassa. PIMC on *ab initio*-menetelmänä eksakti [18], vaikkakin se sisältää vielä haasteita, kuten fermionisysteemien tehokkaan mallintamisen.

Tässä luvussa esitellään lyhyesti polkuintegraaliformalismin keskeisiä käsitteitä ja PIMC-menetelmän taustalla olevaa algoritmia. Termien suomennokset noudattavat pitkälti Juha Tiihosen diplomityötä [19], ja aihealuetta on käsitelty laajemmin Ilkka Kylänpään väitöskirjassa [6].

#### 3.1 Hamiltonin operaattori

QCA-järjestelmän elektronit liikkuvat kvanttipisteiden muodostamassa sähköisessä potentiaalissa. Elektronien kvanttimekaaninen dynamiikka voidaan selvittää, jos tunnetaan systeemin Hamiltonin operaattori  $\hat{H}$ , joka ilmaisee kokonaisenergian. QCA-järjestelmälle se on

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_{i,j} V_{\text{QD}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i < i'} V_e(\vec{r}_i, \vec{r}_{i'}), \quad (3.1)$$

missä koordinaatit  $\vec{r}_i$  ja  $\vec{r}_j$  vastaavat elektroneja ja kvanttipisteitä. Ensimmäinen summatermi vastaa elektronien kineettistä energiaa, toinen summatermi  $\sum V_{\text{QD}}$  vastaa elektronien ja kvanttipisteiden vuorovaikutusta, ja kolmas summatermi  $\sum V_e$  vastaa elektronien keskinäistä repulsiota. Koska kvanttipisteet pysyvät paikallaan,

on niiden keskinäinen vuorovaikutus vakio, ja se voidaan sisällyttää energian nollatasoon.

## 3.2 Polkuintegraaliformalismi

Kvanttimekaniikan formulointi polkuintegraaleilla perustuu lähestymistapaan, jossa hiukkasen liike alkupisteestä loppupisteeseen selitetään kaikkien pisteitä yhdistävien polkujen yhteisvaikutuksena. Klassisella hiukkasella on kahden pisteen välillä yksikäsitteinen liikerata, johon polkuintegraaliformalismi tuo kvantti-ilmiöiden epätarkkuuden ottamalla huomioon myös kaikki muut mahdolliset polut.

Polkuintegraalin käsitettä ei tule sekoittaa viiva- tai tilavuusintegraaliin. Siinä, missä tavanomaiset integraalit lasketaan yli koordinaattiavaruuden osajoukon, lasketaan polkuintegraalit yli polkujen funktioavaruuden. Kaksi pistettä voidaan yhdistää äärettömällä määrällä erilaisia polkuja, joita kaikkia on mahdoton käydä laskennallisesti läpi. Polkujen yhteisvaikutusta voidaan kuitenkin arvioida vain rajallisella määrällä polkuja.

### 3.2.1 Kernel

Hiukkasen liikettä kahden pisteen välillä voidaan kuvata *propagaattorin* avulla. Propagaattori ilmaisee pisteiden välisen siirroksen todennäköisyyden, tai tarkemmin *todennäköisyysamplitudin*. Olkoon  $a = (\vec{x}_a, t_a)$  ja  $b = (\vec{x}_b, t_b)$  hiukkasen liikkeen alkua ja loppupisteet sekä paikassa että ajassa. Olkoon  $\vec{x}(t)$  parametrisoitu polku pisteiden  $a$  ja  $b$  välillä, jolloin liikkeen *action* on viivaintegraali

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{\vec{x}}, \vec{x}, t), \quad (3.2)$$

missä Lagrangen funktio  $L$  on kineettisen ja potentiaalienergian erotus,  $L = T - V$ . Pisteiden  $a$  ja  $b$  välinen todennäköisyysamplitudi saadaan summaamalla *actioniin* verrannollinen eksponentti yli kaikkien mahdollisten polkujen:

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}\vec{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[b, a]}, \quad (3.3)$$

missä  $\mathcal{D}\vec{x}(t)$  ilmaisee integrointia polkujen funktioavaruuden yli. Kutsutaan todennäköisyysamplitudia  $K$  *kerneliksi*, jonka itseisarvon neliö  $|K|^2$  vastaa siirtymän todennäköisyyttä. Olkoon  $c = (\vec{x}_c, t_c)$  uusi piste siten, että  $t_a < t_b < t_c$ . Kernel voidaan

aina esittää kahden ajassa peräkkäisen kernelin konvoluutiona kaavalla [16, s. 37]

$$K(c, a) = \int d\vec{x}_b K(c, b)K(b, a). \quad (3.4)$$

Jätetään kokonaan huomioimatta kernelin  $K(b, a)$  lähtöpiste  $a$  ja tarkastellaan vain päätepisteeseen  $b$  saapuvaa todennäköisyysamplitudia  $\psi(\vec{x}_b, t_b)$ . Yleisempi  $\psi$ :n tulkinta on Schrödingerin yhtälön aaltofunktio, josta käytetään myös termiä *tila* [16, s. 57]. Kernel toimii tilan propagaattorina, ja aikaevoluutio voidaan esittää muodossa

$$\psi(\vec{x}_b, t_b) = \int d\vec{x}_a K(\vec{x}_b, t_b; \vec{x}_a, t_a)\psi(\vec{x}_a, t_a). \quad (3.5)$$

Jos systeemin tila on ajasta riippumaton, voidaan kernel ilmaista energian ominaistilojen  $\phi$  spektrihajotelmana [16, s. 88]

$$K(b, a) = \begin{cases} \sum_n \phi_n(\vec{x}_b)\phi_n^*(\vec{x}_a)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t_b - t_a)} & \text{kun } t_a \leq t_b \\ 0 & \text{kun } t_a > t_b, \end{cases} \quad (3.6)$$

missä indeksi  $n$  käy läpi kaikki ominaistilat.

### 3.2.2 Tiheysmatriisi

Tutkittava termodynaaminen tasapainosysteemi muodostuu puhtaiden kvantttilojen sekatilasta, jossa tilat on painotettu kaavan 2.4 Boltzmannin jakaumalla [19]. Esimerkiksi, jos operaattori  $\hat{O}$  vastaa mitattavaa observaabelia, on sen odotusarvo [16, s. 272]

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle \phi_n | \hat{O} | \phi_n \rangle e^{-\beta E_n}, \quad (3.7)$$

missä  $Z$  on partitiofunktio,  $\phi_n$  Hamiltonin  $\hat{H}$  ominaistila ja  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  käänteinen lämpötila. Partitiofunktio  $Z$  toimii normittavana tekijänä: [18]

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (3.8)$$

Kun systeemi on termodynaamisessa tasapainotilassa, sen kaikki staattiset fysikaaliset ominaisuudet voidaan kuvata *tiheysmatriisin*  $\rho$  avulla [18]. Merkitään yhden hiukkasen koordinaattia symbolilla  $\vec{r}$  ja käytetään  $N$  hiukkasen *konfiguraatiosta*  $\vec{r}_1, \vec{r}_2 \cdots \vec{r}_N$  merkintää  $R$ . Usean hiukkasen tiheysmatriisi koostuu matriisielemen-

tistä

$$\rho(R, R', \beta) = \langle R | e^{-\beta \hat{H}} | R' \rangle \quad (3.9)$$

$$= \sum_i \phi_i^*(R) \phi_i(R') e^{-\beta E_i}, \quad (3.10)$$

joka kuvaa siirtymän todennäköisyyttä tilalta  $R$  tilalle  $R'$  [19]. Tiheysmatriisin avulla voidaan laskea systeemin termodynaamiset suureet, kuten partitiofunktio 3.8

$$Z = \text{Tr}(\rho) = \int dR \rho(R, R; \beta), \quad (3.11)$$

ja kaavan 3.7 operaattorin  $\hat{O}$  odotusarvo [18]

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int dR dR' \rho(R, R', \beta) \langle R | \hat{O} | R' \rangle. \quad (3.12)$$

Tiheysmatriisi 3.10 muistuttaa kaavan 3.6 kerneliä, ja siirryttäessä imaginaariaikaan  $[t_a, t_b] \rightarrow [0, -i\beta\hbar]$ , vastaavat yhtälöt toisiaan [16, s. 273]. Systeemin tiheysmatriisi on siis laskettavissa käyttäen polkuintegraaleja, joissa aikavälinä käytetään käänteistä lämpötilaa. Mitä suurempi on imaginaariajan väli, sitä matalampi on lämpötila.

Tiheysmatriisi käänteisessä lämpötilassa  $\beta$  voidaan esittää kahden korkeamman lämpötilan  $\frac{\beta}{2}$  tiheysmatriisin konvoluutiona [6]

$$\rho(R, R'; \beta) = \int dR'' \rho(R, R''; \frac{\beta}{2}) \rho(R'', R'; \frac{\beta}{2}), \quad (3.13)$$

Jaetaan  $\beta$  hyvin lyhyihin 'aika-askeliin'  $\tau = \frac{\beta}{M}$ , jossa  $M$  on Trotterin luku, ja joka vastaa korkeaa lämpötilaa. Lyhyen aika-askelen eräs keskeisimmistä hyödyistä on tiheysmatriisille käytettävä *primitiiviaprosimaatio*

$$\rho(R, R'; \tau) \approx \int dR'' \langle R | e^{-\tau \hat{T}} | R'' \rangle \langle R'' | e^{-\tau \hat{V}} | R' \rangle, \quad (3.14)$$

jossa Hamiltonin  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$  kineettinen osa ja potentiaaliosa on esitetty toisista erillään. Primitiiviaprosimaatio mahdollistaa vapaan hiukkasen tiheysmatriisin käyttämisen, mistä on erityinen hyöty, koska sille on selvitetty analyttinen ratkaisu. Lyhyen aika-askelen tiheysmatriisi on siten johdettavissa muotoon [6, s. 11]

$$\rho(R, R'; \tau) \approx (4\pi\lambda\tau)^{-\frac{dN}{2}} e^{-\frac{(R-R')^2}{4\lambda\tau}} e^{-\tau V(R')}, \quad (3.15)$$

missä  $\lambda = \frac{\hbar^2}{2m}$ ,  $d = 3$  avaruuden dimensio ja  $N$  massaltaan yhtä suurien hiukkasten lukumäärä.

Esitetään nyt havainnollinen esimerkki siitä, kuinka korkean lämpötilan tiheysmatriisi linkittyy klassiseen mekaniikkaan. Kun kaavan 3.8 partitiofunktioon sijoitetaan kaavan 3.15 tiheysmatriisi, saadaan [16, s. 278]

$$\begin{aligned}
Z &= \int dR \rho(R, R; \tau) \\
&= \int dR (4\pi\lambda\tau)^{-\frac{dN}{2}} e^{-\frac{(R-R)^2}{4\lambda\tau}} e^{-\tau V(R)} \\
&= (4\pi\lambda\tau)^{-\frac{dN}{2}} \int dR e^{-\tau V(R)} \\
&= \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{-\frac{dN}{2}} \int dR e^{-\frac{V(R)}{k_b T}}, \tag{3.16}
\end{aligned}$$

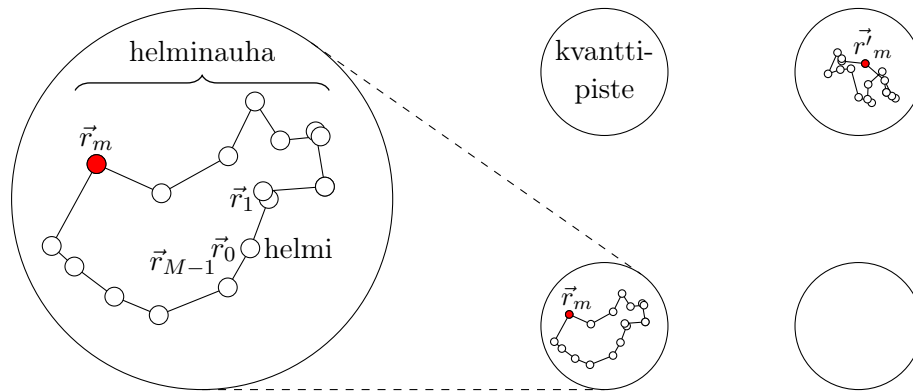
joka on klassisessa mekaniikassa esiintyvä partitiofunktio, mutta jossa nyt esiintyy tarkka normalisointikerroin. Yhtäläisyys on myös havaittavissa, kun tulosta verrataan kaavan 2.5 diskreettiin partitiofunktioon. Jos aika-askel on hyvin lyhyt, ei partitiofunktion suljettu polku  $R \rightarrow R$  pääse muodostumaan kovin pitkäksi, jolloin hiukkasia voidaan arvioida lähes pistemäisinä. Vastaavasti matalassa lämpötilassa on polku levinnyt laajalle alueelle, jolloin kvantti-ilmiöillä on merkittävämpi rooli.

Korkean lämpötilan  $\tau$  tiheysmatriisi on erityinen hyödyllinen, sillä sen avulla voidaan esittää matalan lämpötilan tiheysmatriisi: [19]

$$\rho(R, R'; \beta) = \iint \cdots \int dR_1 dR_2 \cdots dR_{M-1} \rho(R, R_1; \tau) \rho(R_1, R_2; \tau) \cdots \rho(R_{M-1}, R'; \tau). \tag{3.17}$$

Merkitään päätepisteitä  $R = R_0$  ja  $R' = R_M$ . Kutsutaan yhden hiukkasen koordinaattia  $r_m$  imaginaariajanhetkellä  $t = m\tau$  *helmeksi* ja reittiä  $\vec{r}_0, \vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_M$  *helminauhaksi*. Käytetään tästedes termiä *polku* viittaamaan joko yksittäiseen helminauhaan tai koko hiukkaskonfiguraation reittiin  $R_0, R_1 \cdots R_M$ . Kuvassa 3.1 havainnollistetaan yhden QCA-solun systeemiä, jossa on kaksi elektronia ja neljä kiinteää kvanttivistettä. Helminauhat ovat päistänsä suljettuja, ja siten kyseinen polku on mahdollinen otos tiheysmatriisista  $\rho(R, R; \beta)$ .

Kaavan 3.17 tiheysmatriisi on esitetty moniulotteisena integraalina ilman funktionaalisen polkuintegraalin käsitettä. Kun hiukkasen polku on diskretisoitu helminauhaksi, voidaan uusia polkuja muodostaa muuttamalla helmien koordinaatteja. Integroitavan koordinaattiavaruuden dimensio on koordinaattien, hiukkasten ja helmien lukumäärän tulo  $3NM$ . Helminauhat ovat tyypillisesti pitkiä ( $M > 100$ ), ja



**Kuva 3.1** Havainnollistus polun  $R_0, R_1 \dots R_i \dots R_M$  yksittäisestä näytteestä, kun kyseessä on QCA-solu. Polku koostuu kahden elektronin helminauhoista, eli  $R_i = \vec{r}_i, \vec{r}_i^j$ . Trotterin luku on  $M = 16$ . Samaa imaginaariaikaa  $t = m\tau$  vastaavat helmet kohdistavat toisiinsa vuorovaikutuksen ja ne on korostettu punaisella.

integraalin laskemisessa on kannattavaa hyödyntää Monte Carlo -menetelmää.

### 3.3 Monte Carlo -menetelmä

Monidimensioisten integraalien laskeminen on haastavaa perinteisellä Riemannin integraalilla, sillä datapisteiden lukumäärä on suuri. Monte Carlo -integrointi arvioi integraalin arvoa satunnaisesti valittujen datapisteiden avulla. Kun datapisteiden lukumäärä  $n$  kasvaa, pienenee integroinnin virhe  $\Delta s$  suhteessa  $\Delta s \propto \frac{1}{\sqrt{n}}$  riippumatta dimensiosta  $D$ . Monte Carlo -integroinnilla voidaan estimoida integraaleja, jotka ovat muotoa

$$s = \int_{\Omega} p(\vec{x}) f(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (3.18)$$

missä  $\vec{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^D$ ,  $p(\vec{x})$  on todennäköisyysjakauma ja  $f(\vec{x})$  mielivaltainen funktio. Kyseinen integraali voidaan tunnistaa funktiota  $f(\vec{x})$  vastaavaksi odotusarvoksi  $s = \langle f(\vec{x}) \rangle_p$ , jota voidaan arvioida summana [20, s. 588]

$$s \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\vec{x}_i), \quad (3.19)$$

missä  $\vec{x}_i$  on jakaumasta  $p$  otettu satunnaisnäyte.

Tiettyä jakaumaa noudattavien satunnaisnäytteiden valitseminen voi olla haastavaa, jos sen normitettu muoto ei ole tiedossa. Tähän on kehitetty Metropolis-algoritmi [21], jonka yleistettyä muotoa [6] PIMC-menetelmä käyttää kaavan 3.17 integraalin arvioinnissa.



## 3.4 Metropolis-algoritmi

Metropolis-algoritmilla voidaan luoda satunnaisnäytteitä jakaumasta, jonka normittua muotoa ei tunneta. Esimerkkinä tästä on Boltzmannin jakauma ja sen vaikeasti laskettava partitiofunktio [12, s. 346]. Metropolis-algoritmi luo näytteitä satunnaiskävelijän eli *walkerin* avulla, joka muuttaa systeemin konfiguraatiota askelittain, ja käyttää uuden tilan pohjana vain sen hetkistä tilaa. Satunnaiskävelijää kutsutaan *ergodiseksi* kun systeemin jokainen mahdollinen tila voidaan saavuttaa äärellisellä määrällä askelia [6]. Yleinen nimitys satunnaispolkua hyödyntäville Monte Carlo -menetelmille on Markovin ketju Monte Carlo (MCMC, Markov chain Monte Carlo) [20, s. 592].

### 3.4.1 Näytteistäminen

Metropolis-algoritmi luo satunnaisaskeleen menetelmällä, joka ottaa huomioon uuden ja vanhan tilan esiintymistodennäköisyyksien muutoksen, ja se saa kävelijän hakeutumaan kohti korkean todennäköisyyden tiloja. Vaikka satunnaispolku näytteistää jakaumaa täsmällisesti, ovat peräkkäiset askeleet silti voimakkaasti korreloituneita [22, s. 64]. Jos näytteitä otetaan polusta harvemmallalla välillä, voidaan niiden korrelaatiota vähentää.

Kun satunnaiskävelijä on tilalla  $R$ , siirtyy se yhdellä askeleella tilalle  $R'$  todennäköisyydellä  $\mathcal{P}(R \rightarrow R')$ . Mikroskooppisen tasapainon periaate (*principle of detailed balance*) takaa, että siirtymien esiintymistodennäköisyydet ovat yhtä todennäköisiä kumpaankin suuntaan, eli [22, s. 64]

$$\mathcal{P}(R)\mathcal{P}(R \rightarrow R') = \mathcal{P}(R')\mathcal{P}(R' \rightarrow R), \quad (3.20)$$

missä  $\mathcal{P}(R)$  on tilan esiintymistodennäköisyys.

Metropolis-algoritmi luo satunnaisaskeleen esittämällä siirtoehdotuksen, joka joko hyväksytään tai hylätään. Siirtymän todennäköisyys voidaan jakaa kahteen osaan [19]

$$\mathcal{P}(R \rightarrow R') = T(R \rightarrow R')A(R \rightarrow R'), \quad (3.21)$$

missä  $T(R \rightarrow R')$  on siirtoehdotuksen *a priori*-todennäköisyys ja  $A(R \rightarrow R')$  siirron hyväksymistodennäköisyys. Boltzmannin jakauman tapauksessa hyväksymistodennäköisyys  $A$  riippuu lämpötilasta sekä tilojen  $R$  ja  $R'$  välisestä energiamuutoksesta. Negatiivisilla energiamuutoksilla hyväksytään siirtoehdotus aina. Hylkäystodennäköisyys taas kasvaa sen mukaan, mitä suurempi positiivinen energiamuutos on.

Korkeissa lämpötiloissa hyväksytään suurienergisiä muutoksia, mikä vastaa termisen energian vuorovaikutusta. Näytteistämisalgoritmeja käsitellään laajemmin läh-teissä [6][22].

Kun satunnaiskävelijä hakeutuu kohti alhaisia energiatiloja, muodostavat lokaalit energiaminimit haasteen, sillä ne voivat sijaita toisista erillään konfiguraatioavaruudessa. Jos kävelijä jää jumiin yksittäiseen energiaminimiin pitkäksi aikaa, ei rajallisen pituinen satunnaispolku vastaa aitoa tasapainoa, ja jolloin arvio on vääristynyt. Tämä on ergodisen näytteistämisalgoritmin käytännön ongelma.

### 3.4.2 PIMC-menetelmän näytteistäminen

PIMC menetelmän näytteistämistä voidaan tehostaa esittelemällä kaksi eri tyyppistä helminauhan muutosta. *Puolitusmenetelmään* pohjautuva siirto tekee satunnaismuutoksen helminauhan osaväliin, ja taas *siirtoliike* siirtää kerralla koko helminauhan uuteen sijaintiin [6]. Satunnaiskävelysiiroja tekevällä algoritmilla on suuri merkitys siihen, kuinka tehokkaasti integrointiavaruutta kartoitetaan, ja siksi toimivan näytteistämisalgoritmin toteuttaminen on tärkeää.

QCA-systeemin näytteistämistä tehostetaan kahdella eri *siirtoliikellä*, jotka edistävät elektronien liikkuvuutta kvanttipisteiden välillä. Ensimmäinen siirtoliike mallintaa rinnakkaisviritystä, ja se siirtää yksittäisen elektronin QCA-solun kvanttipisteestä toiseen. Toinen siirtoliike mallintaa käännösviritystä, ja se siirtää samanaikaisesti solun molempia elektroneja suorittamalla 90, 180 tai 270 asteen käännöksen. Molemmat siirtoliikkeet mallintavat elektronien tunneloitumista. Koska työn tarkastelu kohdistuu termiseen tasapainotilaan, ei siirtoliikettä vastaavaa tunneloitumisaikaa tarvitse ottaa huomioon.

## 3.5 PIMC-menetelmän ja klassisen miehitysmallin erot

Sekä PIMC-menetelmä että kappaleen 2 miehitysmalli selvittävät systeemin termisen tasapainotilan. Menetelmät kuitenkin kartoittavat tiloja hyvin eroavin menetelmin. Miehitysmalli luo tiukat rajoitteen systeemin tiloille, jotka kaikki se käy systemaattisesti läpi. PIMC-menetelmä ei aseta tiloille rajoitteita, ja se pohjaa laskut satunnaisotoksiin.

Verrataan menetelmien laskennallista puolta. Miehitysmallin suoritus kestää ennalta määrättävän ajan ja tuottaa aina saman lopputuloksen. Mallin yksinkertaistukset

aiheuttavat tulokseen kiinteän virheen jonka arviointi on vaikeaa. Miehitysmallista poiketen PIMC-simulaatio voidaan katkaista kesken suorituksen, jolloin käytetty suoritusaika määrää tuloksen tarkkuuden. Simulaation alkuvaiheessa suureiden arviot ovat karkeita, mutta ne tarkentuvat virherajoineen ajan myötä. Jos PIMC-laskuissa pyritään parempaan tarkkuuteen, ei laskentamallia ole tarve muuttaa rakenteellisesti, vaan yksittäisten tarkkuusparametrien kasvattaminen voi hyvinkin olla riittävää. Eräät keskeisimmät tarkkuuteen vaikuttavat parametrit ovat aika-askel  $\tau$  ja näytteiden lukumäärä  $n$ . Kuitenkaan pelkän tarkkuusparametrin kasvattaminen ei aina käytännössä takaa tuloksen tarkkuutta. Näytteistämisalgoritmin laskennallinen ergodisuus on myös varmistettava, jotta vältetään lokaalien energiaminimien aiheuttamilta vääristymiltä.

Klassisen miehitysmallin ja PIMC-menetelmän välisten tulosten vertailulla ei voida tehdä suoraa päätelmää kvantti-ilmioiden osuudesta, sillä miehitysmallin tulos voi hyvinkin poiketa monipuolisemman klassisen simulaation tuloksesta. Miehitysmallin approksimaatiot on hyvä ottaa huomioon seuraavassa luvussa, kun sitä verrataan PIMC-menetelmään.

## 4. TULOKSET

Tässä luvussa QCA-rakenteiden toimintaa tarkastellaan systeemin termisen tasapainotilan kautta. Käytetyimmät termiset suureet ovat solun polarisaation keskiarvo  $\langle P \rangle$  ja elektronitiheys. Systeemin mallinnukset toteutetaan sekä PIMC-menetelmällä että klassisella miehitysmallilla, ja menetelmien tuloksia polarisaatiolle  $\langle P \rangle$  verrataan keskenään. Ajurin polarisaatiota säädetään askelittain, ja systeemin tilasta muodostetaan polarisaation vastefunktio. Myös miehitysmallin diskreettejä energia-tiloja tarkastellaan, ja ne hahmottavat termisen tasapainotilan koostumusta. Tulosten pohjalta arvioidaan rakenteen toimivuutta ja sen merkitystä osana suurempaa QCA-systeemiä.

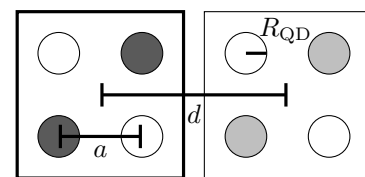
Mallinnetun QCA-järjestelmän mitat esitetään taulukossa 4.1 ja kuvassa 4.1. Mitat vastaavat kolloidisten kvanttipisteiden pienintä kokoluokkaa, joka voi mahdollisesti olla toteutettavissa lähitulevaisuudessa [23]. Koska tarkasteltu QCA on mittasuhteiltaan minimaalinen, vastaa sen toimintalämpötila korkeimpia mahdollisia suuruusluokkia, joita kolloidisilla kvanttipisteillä voidaan saavuttaa. Kaikki simulaatiot suoritetaan ensisijaisesti lämpötilassa  $T = 300$  K, ellei toisin mainita.

Työssä käytetään TTY:n elektronirakenneteorian tutkimusryhmässä kehitettyä pimc3-ohjelmaa, jonka versionumero on laskuissa ollut 3.6.0. Ohjelman simulaatio-parametrit esitetään taulukossa 4.2. Simulointien tarkkuus valitaan tulosten analysoinnin kannalta riittäväksi, kuitenkin ottaen huomioon, että laskut soveltuvat tavallisella tietokoneella suoritettavaksi.

Tässä luvussa mallinnetaan kuutta erilaista QCA-rakennetta, ja niitä vertaillaan kolmena eri parina. Ensimmäisenä tarkastellaan kahden solun kyljittäistä ja kulmitaista kytkentää, jotka ovat kaksi yksikertaisinta tapausta. Sen jälkeen verrataan

mitta	symboli	arvo
kvanttipisteen säde	$R_{\text{QD}}$	0.5 nm
kvanttipisteiden etäisyys	$a$	2.0 nm
soluruudukon välitys	$d$	4.5 nm

**Taulukko 4.1** Simulaatioiden QCA-järjestelmän mitat.



**Kuva 4.1** Mittojen esitys.

parametri	symboli	arvo	pimc3-parametri
kvanttipisteen säde	$R_{\text{QD}}$	0.5 nm	SoftenRadius
kvanttipisteen varaus	$q$	$0.5 e$	ps
aika-askel	$\tau$	1.0	Tau
lämpötila	$T$	(100, 200,) 300 K	Temperature
Trotterin luku <sup>1</sup>	$M$	(3158, 1579,) 1053	Trotter
suhteellinen permittiivisyys	$\varepsilon_r$	1.0	Dielectric
satunnaisaskelien lukumäärä		10000	NumMoves
näytteenottofrekvenssi		50	Interval
toistojen lukumäärä		100	NumBlocks

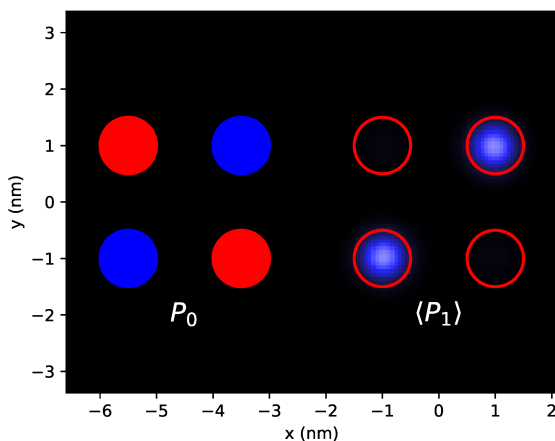
<sup>1</sup>Laskettu ajonaikaisesti aika-askeleen ja lämpötilan perusteella

**Taulukko 4.2** Pimc3-ohjelmassa käytetyt simulointiparametrit.

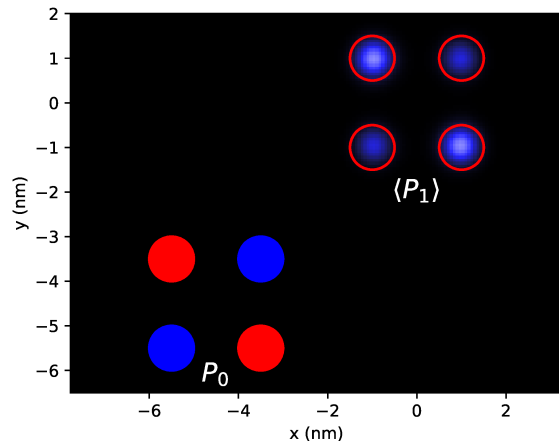
AND ja OR-porttia sekä niiden kykyä tuottaa haluttu laskutoimitus. Lopuksi esitellään monisolujen QCA-systeemien piirteitä mallintamalla suoraa johdinta ja NOT-porttia.

## 4.1 Kyljittäinen ja kulmittainen kytkentä

Tarkastellaan ja vertaillaan solujen kahta eri kytkentämahdollisuutta. Kyljittäin ja kulmittain kytkettyjen solujen elektronitiheydet esitetään kuvissa 4.2 ja 4.3, kun rakenteet ovat  $T = 300$  K lämpötilassa. Tiheyskuvaajat ovat PIMC-laskun tuloksia termisen tasapainotilan elektronijakaumasta, joista voi havaita kytkentöjen suurpiirteisen toiminnan. Kyljittäisessä kytkennässä elektronit ovat melko voimakkaasti polarisoituneet syötteen  $P_0 = +1$  suuntaisesti, mikä on toivottua. Kuvan 4.3 kul-



**Kuva 4.2** Kyljittäisen kytkennän elektronitiheys PIMC-mallinnuksella. Ajurin syötepolarisaatio on  $P_0 = +1$  ja solun vaste  $\langle P_1 \rangle \approx +0.9$ , kun  $T = 300$  K.

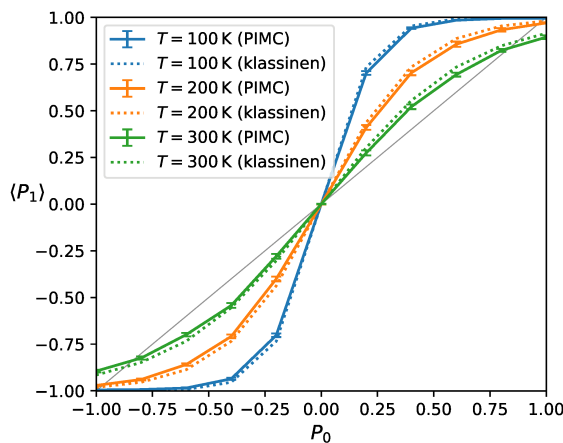


**Kuva 4.3** Kulmittaisen kytkennän heikko vaste ilmenee siinä, ettei vastesolu ole kovin voimakkaasti polarisoitunut.  $P_0 = +1$ ,  $\langle P_1 \rangle \approx -0.3$  ja  $T = 300$  K.

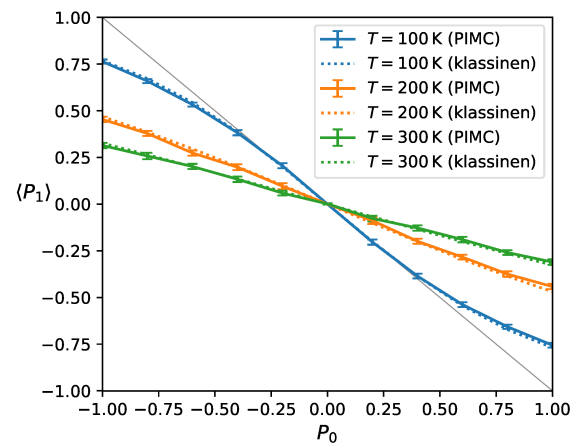
mittaisen kytkennän heikkous taas ilmenee suoraan siitä, ettei vastesolu ole selkeästi polarisoitunut. Polarisaatio on enimmäkseen kääntynyt, mutta se ei silti ole diskreetisti tilassa  $\langle P_1 \rangle = -1$ .

Tarkastellaan sitten polarisaatiota tarkemmin mittaamalla sen termien odotusarvo kaavalla 2.2. Ajurin syötepolarisaatiota säädetään välillä  $P_0 \in [-1, +1]$ , josta mitataan polarisaation  $\langle P_1 \rangle$  vastefunktio. Termistä tasapainotilaa mallinnetaan kolmessa eri lämpötilassa  $T = 100, 200, 300$  K. Kuvissa 4.4 ja 4.5 esitetään kyljittäisen ja kulmittaisen kytkennän vastefunktiot. Alhaisen lämpötilan havaitaan kasvattavan toiminnalle tärkeää epälineaarisuutta. Vaikka elektronitiheyskuvaajassa 4.2 kyljittäinen kytkentä näyttää silmämääräisesti toimivan hyvin, ilmaisee kuva 4.4 tarkemmin sen, että 300 K:ssä syötteen arvolla  $P_0 = +1$  vaste  $\langle P_1 \rangle \approx +0.9$  jää alle toivotun arvon  $\langle P_1 \rangle = +1$ . Lämpötilassa 100 K kyljittäiskytkennän vastefunktio ilmaisee jo kuitenkin voimakkaan epälineaarisen vasteen. Jos tarkastellaan vastaavasti kuvan 4.5 kulmittaista kytkentää, havaitaan polarisaation kääntymisen ja signaalin voimakas heikkeneminen kaikissa lämpötiloissa. Tiedetään, että kyseinen kulmittainen kytkentä ei toimi luotettavana NOT-porttina lämpötila-alueella  $T \geq 100$  K.

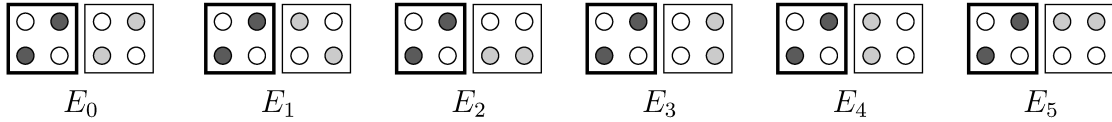
Huoneenlämpötilassa  $T = 300$  K kummankaan kytkennän vastefunktio ei toteuta tarvittavaa epälineaarisuutta, eikä siten signaalia kyetä käsittelemään kovin luotettavasti laajemmissa systeemeissä. Laajojen systeemin toimintaa ei voida kuitenkaan päätellä suoraan pelkän vastefunktion perusteella, sillä varausjakaumalla heikennetty syöte  $P_0$  ei täysin vastaa vasteen heikkoa keskiarvoa  $\langle P_1 \rangle$ .



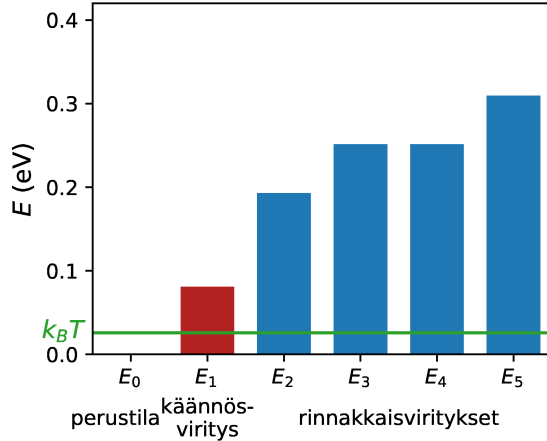
**Kuva 4.4** Kyljittäiskytkennän polarisaation vastefunktio osoittaa sen epälineaarisen luonteen. Mitä alhaisempi lämpötila, sitä ideaalisemmin kytkentä toimii. PIMC-menetelmän ja klassisen miehitysmallin tulokset yhtenevät.



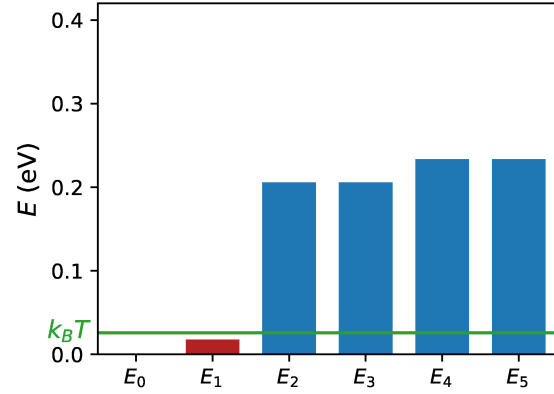
**Kuva 4.5** Kulmittaisen NOT-kytkennän vastefunktio osoittaa sen heikon toimivuuden kaikissa kolmessa lämpötilassa.



**Kuva 4.6** Kyljittäiskytkennän perustila  $E_0$ , käänösviritys  $E_1$  ja rinnakkaisviritykset  $E_2$ – $E_5$ .



**Kuva 4.7** Kyljittäiskytkennän energiatiilat miehitysmallissa, kun perustila  $E_0$  on energian nollassa. Punainen väri ilmaisee käänösviritystä, ja vihreä viiva ilmoittaa termisen energia lämpötilassa  $T = 300$  K. Energiatiilat  $E_0$ – $E_5$  esitetään kuvassa 4.6.

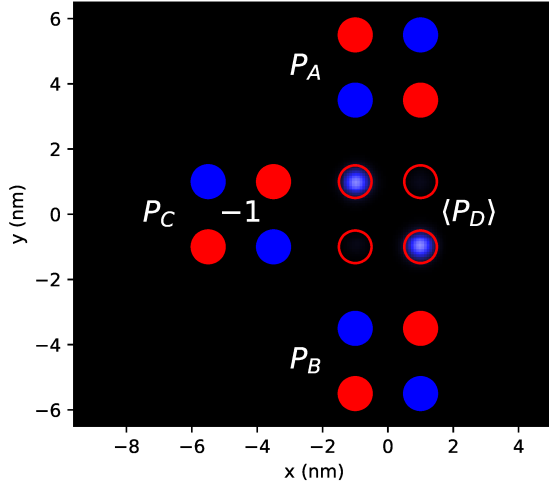


**Kuva 4.8** Kulmittaiskytkennän energiatiilat osoittavat sen heikon toimintakyvyn sillä, että käänösvirityksen ja termisen energian suhde  $\frac{E_1}{k_B T}$  on alhainen.

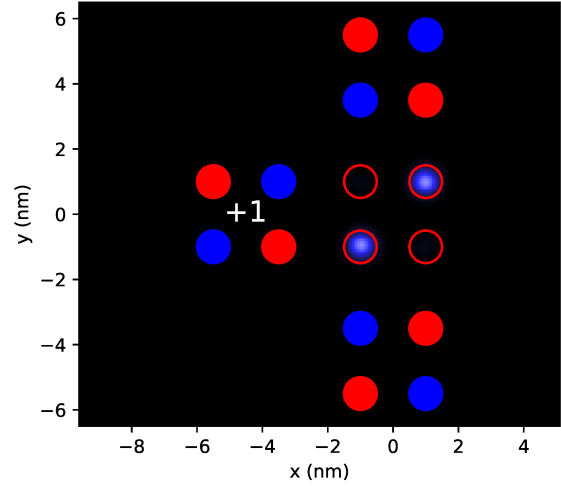
NOT-kytkennän heikko vaste voidaan selittää luvun 2 miehitysmallin viritysenenergioilla. Yksisoluisella rakenteella energiatiiloja on 6 kpl, jotka esitetään kyljittäiskytkennälle kuvassa 4.6. Kuviin 4.7 ja 4.8 piirretään kyljittäisen ja kulmittaisen kytkennän energiatiilojen histogrammit, joissa energian nollassa on valittu perustila  $E_0$ . Käänösviritys merkitään punaisella ja rinnakkaisviritys sinisellä. Vihreä taso ilmaisee keskimääräisen termisen energian  $k_B T$  lämpötilassa  $T = 300$  K. Havaitaan, että käänösviritys  $E_1$  on rinnakkaisvirityksiä  $E_2$ – $E_5$  huomattavasti alhaisemmalla energiatasolla. Kulmittaiskytkennän käänösviritys on jopa termistä energiaa alhaisempi, mikä selittää täysin sen heikon suoriutumisen.

## 4.2 AND- ja OR-portti

Tarkastellaan seuraavaksi kahden signaalin yhdistämistä AND- ja OR-porteissa. Kuvissa 4.9 ja 4.10 esitetään molempien porttien elektronitiheyskuvaajat sisääntulosignaalien ollessa  $P_A = +1$  ja  $P_B = -1$ . Lukitun ajurin tila  $P_C$  on portteja erottava tekijä, ja vaste  $\langle P_D \rangle$  muodostuu enemmistöperiaatteen mukaisesti. Voidaan havaita, että laskutoimitukset  $\text{AND}(+1, -1) = -1$  ja  $\text{OR}(+1, -1) = +1$  toteutuvat oikein.

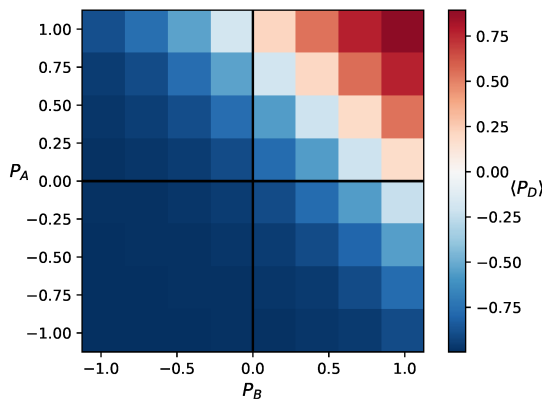


**Kuva 4.9** AND-portti, jonka sisääntuloiloina toimivat syötteen  $P_A$  ja  $P_B$ . Vastepolarisaatio  $\langle P_D \rangle$  toteuttaa laskutoimituksen  $AND(+1, -1) = -1$  oikein. Lämpötila on  $T = 300$  K.

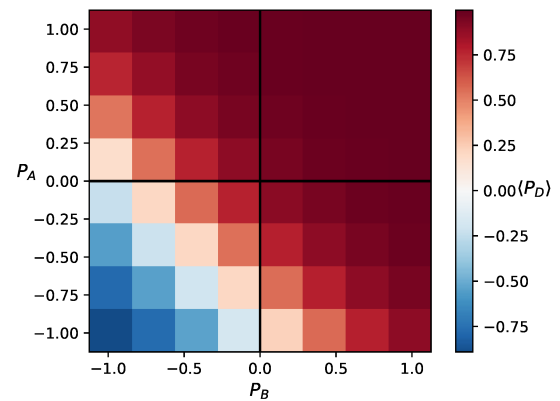


**Kuva 4.10** OR-portti, joka toteuttaa laskutoimituksen  $OR(+1, -1) = +1$ .

Syötepolarisaatioiden  $P_A$  ja  $P_B$  arvoja muutetaan toisistaan riippumatta, ja porttien vaste  $\langle P_D \rangle$  mitataan. PIMC-menetelmän tuottamat tulokset esitetään kuvien 4.11 ja 4.12 värikarttoina. Molemmat portit toimivat melko hyvin vahvoilla syötteillä, mutta porttien toiminta ei ole ideaalinen syötteiden ollessa heikkoja. Jos AND-portti olisi puhtaasti ideaalinen, antaisi se kuvaajan ensimmäisessä neljänneksessä  $P_A > 0 \wedge P_B > 0$  vasteen  $\langle P_D \rangle = +1$  ja muualla vasteen  $\langle P_D \rangle = -1$ . Mallinnetun AND-portin polarisaatio on kuitenkin  $\langle P_D \rangle \approx +1$  vain kun  $P_A \approx +1 \wedge P_B \approx +1$ , ja muualla ensimmäisessä neljänneksessä on vaste heikko tai väärä. OR-portin kuvaaja



**Kuva 4.11** AND-portin vaste  $\langle P_D \rangle$  sen kahden syötteen  $P_A$  ja  $P_B$  funktiona. Havaitaan että  $\langle P_D \rangle$  näyttää riippuvan vain summasta  $P_A + P_B$ .  $T = 300$  K.



**Kuva 4.12** OR-portin vastepolarisaatio. Jos polarisaatioiden  $P_A$ ,  $P_B$  ja  $P_D$  etumerkit käännetään, vastaa kuvaaja AND-porttia.

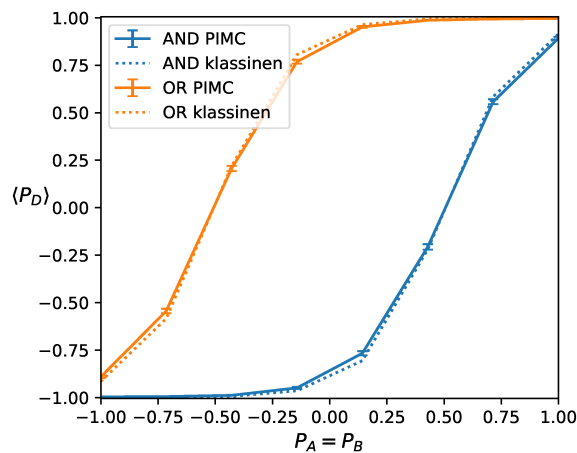


jasta 4.12 voidaan todeta AND-porttia vastaava käyttäytyminen, tosin sillä erolla, että polarisaation etumerkki on vastakkainen. Jos bitin arvoiksi 1, 0 valitaankin polarisaatiot  $-1, +1$ , vaihtuu AND-portti OR-portiksi ja päinvastoin.

Huomionarvoista on, että vaste  $\langle P_D \rangle$  vaikuttaa olevan esitettävissä funktiona, joka riippuu vain syötteiden summasta ( $P_A + P_B$ ). Tämä voidaan havaita kuvaajien samanväristen ruutujen muodostamista tasa-arvokäyristä, jotka ovat muotoa  $P_A + P_B = \text{vakio}$ . Viedään havainto hieman pidemmälle, ja esitetään enemmistöportille vastaava päätelmä, jonka mukaan sen vaste on riippuvainen vain syötteiden summasta, eli  $\langle P_D \rangle = f(P_A + P_B + P_C)$ . Jos summaperiaate pätee edes karkeasti, voi se olla hyödyllinen heuristiikka QCA-rakenteiden suunnittelussa. Majoriteettiportissa yhdistettävät signaalit eivät saa erota merkittävästi voimakkuudeltaan, jolloin AND- ja OR-porttien syötteiden alarajaksi tulee  $|P| > 0.5$ .

Vertaillaan seuraavaksi, kuinka suuri ero esiintyy PIMC-simulaation ja miehitysmallin välillä. Kuvaajaan 4.13 on piirretty AND- ja OR-värikarttojen diagonaali  $P_A = P_B$ , jonka suunnassa polarisaation muutos on suurin. Havaitaan, että miehitysmalli pysyy edelleen melko hyvin PIMC-laskun tuloksessa. Kuvaajissa esiintyvät tutut epälineaariset vastefunktiot, mutta jotka ovat nyt siirtyneet x-akselilla.

AND-portin vastefunktio arvoilla  $P_A = P_B = +1$  ei täysin yllä polarisaatioon  $+1$ . Sama pätee käänteisesti myös OR-portilla. Käyttäytymien on ymmärrettävää, sillä vastakkaiseen asentoon lukittu  $P_C$  häiritsee tilaa. Jos hyödynnetään edellä esitettyä



**Kuva 4.13** AND- ja OR-portin polarisaation vastefunktio kun syötteet  $P_A$  ja  $P_B$  ovat samat. Funktiot vastaavat kuvaajien 4.11 ja 4.12 diagonaalien poikkileikkausta.  $T = 300$  K.

enemmistöportin summaperiaatetta, voidaan päätellä

$$\langle P_D \rangle = f(P_A + P_B + P_C) \quad (4.1)$$

$$= f((+1) + (+1) + (-1)) \quad (4.2)$$

$$= f(0 + 0 + (+1)). \quad (4.3)$$

AND-portin vaste on suurin piirtein sama kuin kahden solun kyljittäiskytkentä arvolla  $P_0 = +1$ .

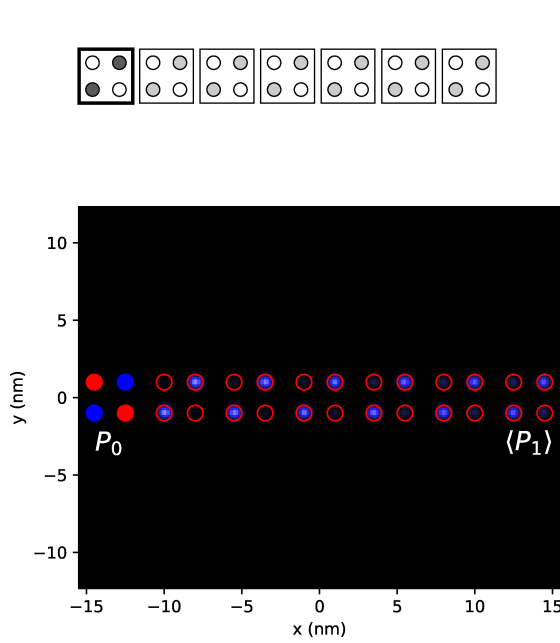
PIMC-menetelmän ja miehitysmallin tulokset ovat edellä tarkastelluissa tapauksissa vastanneet hyvin toisiaan, mille voidaan etsiä selitystä viritysenenergioiden suuruusluokasta. Miehitysmalli voi saavuttaa kohtalaisen tarkkuuden esimerkiksi silloin, jos viritysenenergiat ovat kertaluokkia suurempia kuin mallin mitätöimät ilmiöt. Tulosten yhtenevyys viittaa joka tapauksessa siihen, että klassisilla laskuilla voidaan mahdollisesti arvioida termistä tasapainotilaa kohtalaisen tarkasti. Koska kvanttipisteiden suuruuksilla ei ole vaikutusta miehitysmallin toimintaan, viittaa tulos myös osittain siihen, ettei kvanttipisteen koko 0.5 nm merkittävästi vaikuta solun toimintaan. Edellä tarkastellut QCA-systemit rajautuvat kuitenkin vain yhden solun dynamiikkaan, ja sen vastapainoksi tarkastellaan seuraavaksi kahta monisoluisia rakennetta.

### 4.3 Johdin ja NOT-portti

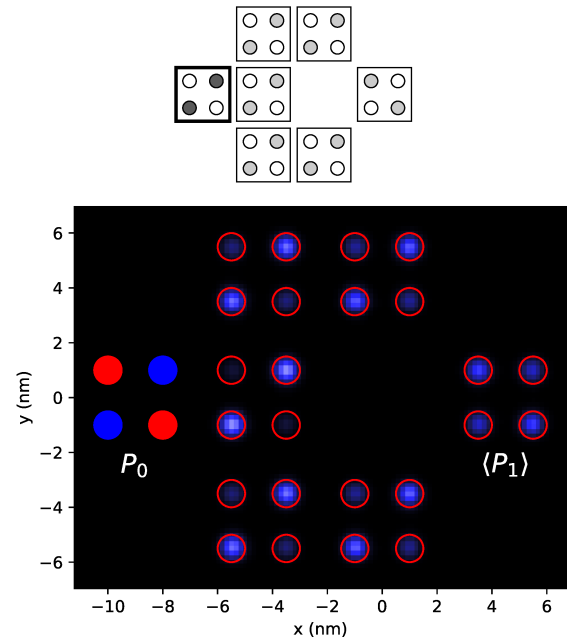
Tutkitaan lopuksi, kuinka monisoluiset rakenteet käyttäytyvät simulaatioissa. Kohteiksi valitaan suora signaalinjohdin ja NOT-portti, jotka kumpikin sisältävät ajurin sekä 6 solua. Monisoluisilla rakenteilla selvitetään signaalin heikkeneminen usean solun peräkkäisessä kytköksessä. Syötteenä toimii ajurin polarisaatio  $P_0$ , ja vaste  $\langle P_1 \rangle$  mitataan nyt rakenteen viimeisestä solusta.

Kuvissa 4.14 ja 4.15 esitetään johdin- ja NOT-rakenteet sekä niitä vastaavat elektronitiheydet, kun lämpötila on  $T = 300$  K. Tiheyskuvaaja ilmaisee johtimen toimivan melko hyvin, kun taas NOT-portin vaste  $\langle P_1 \rangle$  on vähintään yhtä heikko kuin kulmittaiskytkennässä.

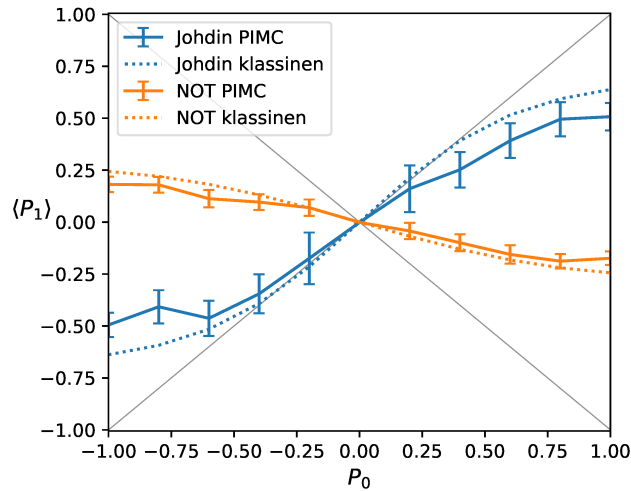
Piirretään molempien rakenteiden vastefunktiot kuvaan 4.16. Kummankin rakenteen vaste on oikeanmerkkinen, mutta toimintakyky on kaukana tavoitellusta. PIMC-mallissa esiintyy aiempia mittauksia korkeammat virherajat, sillä monielektronisysteemit ovat laskennallisesti haasteellisimpia, mikä taas johtuu polkujen vapausasteista ja näytteistämistehokkuudesta. Virherajojen puitteissa miehitysmalli ei ole kovin huono, vaikka tuottaakin selvästi PIMC-mallia korkeampia arvoja. Menetelmien ero voi johtua esimerkiksi miehitysmallin sisäisistä approksimaatioista, tai



**Kuva 4.14** Johdin, jossa syöte  $P_0$  ja vaste  $\langle P_1 \rangle$  yhdistetään kuudella kyljittäiskytkennällä.  $T = 300$  K.



**Kuva 4.15** NOT-portti, jonka kaksi kulmittaiskytkentää kääntää vasteen  $\langle P_1 \rangle$ . Vaste on heikko, eikä se ole yksittäistä kulmittaiskytkentää parempi.



**Kuva 4.16** Johtimen ja NOT-portin polarisaatio kuudennessa solussa. Kumpikin signaali on merkittävästi vaimentunut, eikä täytä tarvittavaa epälineaarisuutta.  $T = 300$  K.

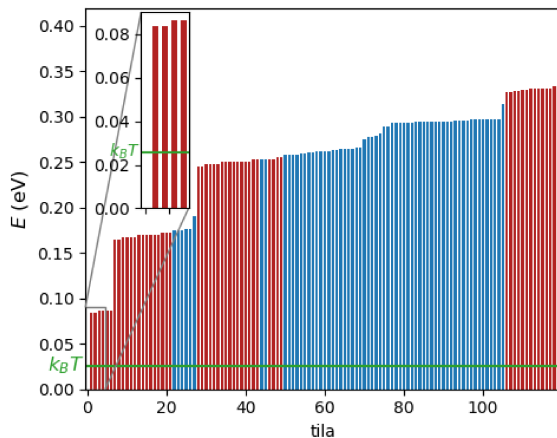
sen simulointikoodissa esiintyvistä virheistä.

Miehitysmallin käänös ja rinnakkaisviritystiloja on yhteensä  $6^6 \approx 47000$ . Laskut kevenevät merkittävästi, jos tarpeellinen tarkkuus voidaan saavuttaa ottamalla huomioon pelkät käänösviritykset, joita on  $2^6 = 64$ . Kuvissa 4.17 ja 4.18 esitetään

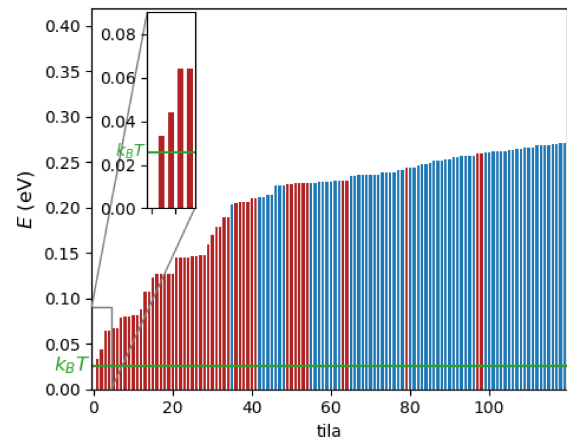
johtimen ja NOT-portin 120 ensimmäistä miehitysmallin energiatilaa. Punaisella merkityt käänkösviritykset muodostavat suuren osan alhaisista energiatiloista, vaikka niiden kokonaisosuus on hyvin pieni  $2^6/6^6 \approx 0.1\%$ .

Tarkastellaan energiatilakuvaajien 4.17 ja 4.18 ensimmäisiä tiloja kuvan suurenetulta alueelta. Johtimen kaikki viritystilat ovat termistä energiaa huomattavasti korkeampia, mikä osittain selittää sen hyvän toimintakyvyn. NOT-portin ensimmäinen viritystila on vastesolun käänkösviritys, ja se on vain hieman termistä energiaa korkeampi. Vaikka käänkösvirityksen energia on huomattavasti korkeampi kuin kuvan 4.8 kulmittaiskytkennän, ei NOT-portti ole silti kulmittaiskytkentää parempi. Tämä johtuu siitä, että NOT-portilla esiintyy ensimmäisen käänkösvirityksen lisäksi myös lukuisia muita alhaisia energiatiloja. NOT-portin signaali ei siis heikkene vain negaation muodostamiskohdassa, vaan myös muualla portin matkalla.

Johtimen energiatasot muodostavat selkeän porrastuksen, jossa jokainen uusi porras vastaa sitä, että käänkösvirittyneiden kytkentöjen lukumäärä kasvaa yhdellä. Porrasjako ei silti ole havaittavissa NOT-portissa, sillä sen rakenteen kaksijakoinen muoto erottaa samanenergiset tilat toisistaan. Esimerkiksi NOT-portin ajuri on kyljittäin kytketty yhteen soluun ja kulmittain kahteen, jolloin systeemi koostuu energialtaan eriarvoisista kytkennöistä. Sillä kokonaisenergia on karkeasti ottaen yksittäisten kytkentöjen energioiden summa, ei porrastus tule NOT-portissa



**Kuva 4.17** Suoran johtimen 120 ensimmäistä energiatilaa miehitysmallissa. Punainen väri kuvaa käänkösviritystä, sininen rinnakkasviritystä ja vihreä taso kuvaa termistä energiaa lämpötilassa  $T = 300\text{ K}$ . Kaikki alhaisimmat energiatilat koostuvat käänkösvirityksistä, vaikka niitä on huomattavasti vähemmän kuin rinnakkasvirityksiä.



**Kuva 4.18** NOT-portin miehitysmallin energiatilat. Ensimmäinen viritystila on korkeammalla kuin kuvan 4.8 kulmittaiskytkennän, mutta tämä ei kuitenkaan suoraan takaa parempaa toimintavarmuutta. Perustilan  $E_1$  lisäksi myös useat muut tilat ovat lähellä termistä energiaa  $k_B T$ , mikä lisää viritysten määrää.

		johdin	NOT
<b>PIMC</b>			
$\langle P_1 \rangle_Q$	polarisaatio	0.507(7)	-0.174(3)
<b>miehitysmalli</b>			
$\langle P_1 \rangle_{C,(6/6)}$	polarisaatio, käännös- ja rinnakkaisviritykset	0.638	-0.244
$\langle P_1 \rangle_{C,(2/6)}$	polarisaatio, käännösviritykset	0.646	-0.245
$\sum \mathcal{P}_r$	todennäköisyys rinnakkaisvirityksille	0.0063	0.0038

**Taulukko 4.3** Laskumenetelmien vertailu syötepolarisaation ollessa  $P_0 = +1$ . Kahden ensimmäisen rivin tulokset ovat kuvaajan 4.16 mukaisia. Miehitysmallin tulokset paljastavat, että rinnakkaisviritystilat voidaan jättää huomioimatta.

yhtä selkeästi esiin.

Vertaillaan vielä menetelmien numeerisia arvoja taulukossa 4.3. Siinä esiintyvä PIMC-polarisaatio  $\langle P_1 \rangle_Q$  ja miehitysmallin polarisaatio  $\langle P_1 \rangle_{C,(6/6)}$  vastaavat suoraan kuvaajan 4.16 lukuarvoja syötteellä  $P_0 = +1$ . Miehitysmallin arvon  $\langle P_1 \rangle_{C,(2/6)}$  laskemisessa otetaan huomioon vain solun käännösviritystilat  $\pm 1$ . Rinnakkaisviritysten kokonaistodennäköisyys  $\sum \mathcal{P}_r$  kertoo sen partitiofunktion osuuden, jota käännösviritykset eivät kata. Koska osuus on hyvin pieni, voi miehitysmallin laskut toteuttaa käyttäen pelkkiä käännösvirityksiä. Kyseinen approksimaatio voi olla hyödyllinen myös muille työn ulkopuolisille simulaatiomenetelmille.

## 5. YHTEENVETO

Kvanttipistesoluautomaatti prosessoi digitaalisia signaaleja uudella lähestymistavalla, ja se valjastaa käyttöönsä yksittäisten elektronien liikkeen minimaalisessa mitataavassa. Kvanttipistesolu esiintyy kahdessa polarisaation tilassa  $+1$  ja  $-1$ , jotka vastaavat loogisia bittejä 1 ja 0. Solun bitin tila välittyy viereisiin soluihin, jolloin solujonon peräkkäiset kytkennät kuljettavat signaalia. Signaalin eteneminen ja loogiset laskutoimitukset perustuvat systeemin fysikaaliseen perustilaan asettumiseen. Korkeissa lämpötiloissa ei toiminta ole kuitenkaan vakaata, sillä terminen kohina virittää systeemin herkästi pois perustilan energiaminimistä.

QCA-systeemien toimintavarmuus mitataan termisen tasapainon avulla, ja polarisaation termistä keskiarvoa käytetään signaalin vahvuuden määrittämisessä. Systeemien käsittelemän ulostulosignaalin vahvuudella arvioidaan niiden vakautta. Kun ajurilla heikennetään syötettävää signaalia, voidaan käsitellyn signaalin vahvuudesta piirtää vastefunktio. Vastefunktion tulisi olla epälineaarinen siten, että systeemi vahvistaa heikentyneen signaalin.

Tässä työssä QCA-systeemien termistä vakautta arvioidaan PIMC-menetelmällä. PIMC pohjautuu kvanttimekaanisiin polkuintegraaleihin, joita se arvioi numeerisella Monte Carlo -menetelmällä. Termistä tasapainoa näytteistetään satunnaiskävelijällä, jonka toimintaa on tehostettu solun elektronimiehitykseen kohdistetuilla siirtoliikkeillä. Polarisaation terminen keskiarvo selvitetään näytteiden keskiarvona. PIMC-menetelmän vertailukohteeksi otetaan klassiseen fysiikkaan perustuva miehitysmalli, joka laskee termisen tasapainon käymällä läpi elektronimiehitysten eri kombinaatiot.

Työssä simuloidaan kuutta alkeellista QCA-systeemiä, jotka tuovat esille lämpötilan asettamia keskeisiä haasteita. Kahden solun kyljittäiskytkentä toimii lämpötilassa  $T = 100$  K, mutta se ei saavuta täyttä tarvittavaa varmuutta huoneenlämpötilassa  $T = 300$  K. Jos yksittäinen solukytkentä ei ole luotettava, ei myöskään sarjaan kytketyn solujonon toteuttaminen onnistu. Kyljittäiskytkennästä poiketen on kullittaiskytkentä epävakaa kaikissa mitatuissa lämpötiloissa 100–300 K, mikä asettaa haasteita NOT-portin toteuttamiselle. Loogiset AND- ja OR -portit toimivat koh-

talaisen hyvin lämpötilassa  $T = 300$  K, jos molemmat syötesignaalit ovat vahvoja. Tulosten pohjalta tehdään esitys, jonka mukaan majoriteetinportin ulostulosignaali voidaan arvioida vain kolmen syötesignaalin summan perusteella. Kuusisolui-  
sten systeemien simulaatiot tuovat esille usean peräkkäisen solukytkennän yhteisvaikutuksia. Signaali heikkenee sarjaan kytketyn solujonon matkalla, mikä on odotettavaa kyljittäiskytkennän tuloksen perusteella. Vastaavasti kaksijakoinen NOT-portti toimii erityisen heikosti, sillä sen signaali heikkenee sekä kulmittaisissa että kyljittäisissä kytkennöissä.

PIMC-menetelmän ja klassisen miehitysmallin tuottamat tulokset vastaavat hyvin toisiaan silloin, kun QCA-systeemit ovat pieniä. Laajemmillaakin systeemeillä on tulosten vastaavuus kohtalainen, mikä viittaa siihen, että systeemien toimintavarmuutta voidaan suurpiirteisesti kuvata klassisin ilmiöin. Miehitysmallin erittelemät viritysenenergiat havainnollistavat systeemin eri tiloja, ja ne myös paljastavat termisen tasapainotilan koostumuksen. Miehitysmalli nostaa esille systeemin virhealttiimmat osat, jotka voivat olla apuna QCA-rakenteiden suunnittelussa. Tarkasteltujen QCA-solujen elektronit pysyvät lähes pelkästään polarisaation tiloissa  $\pm 1$ , mikä voi mahdollistaa joidenkin simulaatioiden yksinkertaistamisen.

Työssä tarkastellun QCA-systeemin toimivuutta voidaan parantaa joko laskemalla lämpötilaa tai pienentämällä solun mittoja. Alhainen toimintalämpötila tuo kuitenkin lisähaasteita, eikä tarvittavan pienille QCA-soluille tunnetta vielä valmistusmenetelmiä. Todellisten QCA-systeemien simuloiminen voi myös osoittautua ideaalisia malleja haastavammaksi. Laajaalle jatkotutkimukselle ja kehitystyölle on siis tarvetta sekä nanoteknologian että simulointimenetelmien saralla. Haasteistaan huolimatta QCA on silti houkutteleva digitaalipiiriteknologian mahdollisuus.

## LÄHTEET

- [1] T. Cole and J.C. Lusth. Quantum-dot cellular automata. *Progress in Quantum Electronics*, 25(4):165 – 189, 2001.
- [2] I.L. Markov. Limits on fundamental limits to computation. *Nature*, 512(7513):147–154, 2014.
- [3] C. S. Lent, P.D. Tougaw, W. Porod, and G.H. Bernstein. Quantum cellular automata. *Nanotechnology*, 4(1):49, 1993.
- [4] C.S. Lent, D. Tougaw, and W. Porod. Quantum cellular automata: The physics of computing with quantum dot molecules. *IEEE PhysComp*, 94:5 – 13, 1994.
- [5] J. Tiihonen, A. Schramm, I. Kylänpää, and T.T. Rantala. Exact modeling of finite temperature and quantum delocalization effects on reliability of quantum-dot cellular automata. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 49(6):065103, 2016.
- [6] I. Kylänpää. *First-principles finite temperature electronic structure of some small molecules*. PhD thesis. Tampere University of Technology, 2011.
- [7] P. Rendell. Game of Life Universal Turing Machine. In *Turing Machine Universality of the Game of Life*, pages 71–89. Springer International Publishing, Cham, 2016.
- [8] I. Hänninen. *Computer arithmetic on quantum-dot cellular automata nanotechnology*. PhD thesis, Tampere University of Technology, 2009.
- [9] J.C. Lusth. Symmetric versus asymmetric charge neutralization in quantum-dot cellular automata. In *Proceedings of the 2001 1st IEEE Conference on Nanotechnology. IEEE-NANO 2001 (Cat. No.01EX516)*, pages 380–385, 2001.
- [10] E. Räsänen, A. Putaja, and Y. Mardoukhi. Optimal control strategies for coupled quantum dots. *Open Physics*, 11(9), January 2013.
- [11] Géza Tóth and Craig S. Lent. Role of correlation in the operation of quantum-dot cellular automata. *Journal of Applied Physics*, 89(12):7943–7953, 2001.
- [12] D.V. Schroeder. *An Introduction to Thermal Physics*. Addison Wesley, 1999.
- [13] H.B. Enderton. *A Mathematical Introduction to Logic*. Elsevier Science, 2001.
- [14] S. Haltsonen, E.T. Rautanen, and J. Levomäki. *Digitaalitekniikka*. Edita, 2013.



- [15] J.E. Morris and K. Iniewski. *Nanoelectronic Device Applications Handbook. Devices, Circuits, and Systems*, pages 239–254. CRC Press, 2013.
- [16] R.P. Feynman, A.R. Hibbs, and D.F. Styer. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. Dover Books on Physics. Dover Publications, 2010.
- [17] K.R. Glaesemann and L.E. Fried. A path integral approach to molecular thermochemistry. *The Journal of Chemical Physics*, 118(4):1596–1603, 2003.
- [18] D.M. Ceperley. Path integrals in the theory of condensed helium. *Reviews of Modern Physics*, 67(2):279–355, April 1995.
- [19] J. Tiihonen. *Vedyn Stark-ilmion ja polarisoituvuuksien mallintaminen polkuintegraali-Monte Carlo-menetelmällä*. Diplomityö, Tampere University of Technology, 2014.
- [20] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016.
- [21] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, June 1953.
- [22] M.H. Kalos and P.A. Whitlock. *Monte Carlo methods*. WILEY-VCH, Weinheim, 2., rev. and enl. ed edition, 2008. OCLC: 254048500.
- [23] R. Zhang, T.J. Emge, C. Zheng, and J. Li. The first single-sized ( $\sim 1$  nm) and periodically ordered array of  $\text{In}_2\text{Te}_3$  semiconductor quantum dots self-assembled in solution. *J. Mater. Chem. A*, 1(2):199–202, 2013.
- [24] M. Mansfield and C. O’Sullivan. *Understanding physics*. Wiley, Hoboken, N.J, 2nd ed edition, 2010.

## A. OHJELMAKOODIT

Kaikki työssä esiintyvät tulokset ovat toistettavissa `pimc3`-ohjelman ja alla esitetyn linkin ohjelmakoodien avulla.

[https://gitlab.com/tolvanea/QCA\\_calc](https://gitlab.com/tolvanea/QCA_calc)

Linkin koodeihin sisältyy:

- klassiseen malliin perustuva simulaatio-ohjelma,
- `pimc3`-ohjelman automatisoinnin toteuttava skripti ja
- datan analysoinnin ja kuvaajien piirtämisen toteuttavat skriptit.

Tarkempia `pimc3`-ohjelman tietoja voi tiedustella TTY:n elektronirakenneteorian ryhmältä.

## B. KVANTTIPISTEEN POTENTIAALI

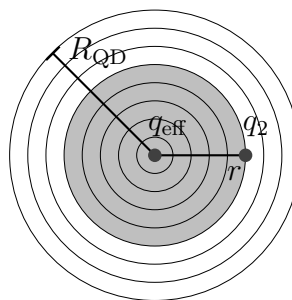
Johdetaan kvanttistemallin potentiaali tasaisesti varautuneen pallon ja pistevarauksen välillä. Coulombin lain mukaan kahden pistevarauksen  $q_1$  ja  $q_2$  välinen voima on

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q_1q_2}{r^2} = k_\epsilon \frac{q_1q_2}{r^2} \quad (\text{B.1})$$

missä  $k_\epsilon = \frac{k}{\epsilon_r}$  on suhteellisen permittiivisyyden sisältävä Coulombin vakio ja  $r$  varauksen etäisyys. Samanmerkkisillä varauksilla voima on hylkivä.

Olkoon varaus  $q_1$  levittäytynyt homogeenisesti pallon alueelle. Pallon voi ajatella koostuvan differentiaalisen ohuista sisäkkäisistä pallonkuorista, joiden varaus on  $dq$ . Varatun kuoren ulkopuolella oleva pistevaraus  $q_2$  kokee efektiivisesti voiman, jossa pallonkuoren tilalla on yksi pistevaraus  $dq$ . Jos pistevaraus  $q_2$  sijaitsee vastaavasti varautuneen pallon kuoren sisäpuolella, ei siihen kohdistu vuorovaikutusta ollenkaan. [24, ss. 196–199]. Kvanttipisteen sisällä olevaan pistevaraukseen kohdistuu siis voima, joka lasketaan pelkästään sisempien pallonkuorten vuorovaikutusten summana. Tilannetta havainnollistetaan kuvassa B.1.

Olkoon kvanttipisteen varaus  $q_1$ , säde  $R_{\text{QD}}$  ja tilavuus  $V_R = \frac{4}{3}\pi(R_{\text{QD}})^3$ . Olkoon myös sen sisällä pistevaraus  $q_2$  etäisyydellä  $r$  keskipisteestä. Tällöin  $q_2$ :een kohdistuva voima on efektiivisesti sama kuin  $r$ -säteisen homogeenisen pallovarauksen  $q_{\text{eff}}$ . Kun kvanttipisteessä vallitsee homogeeninen varaustiheys  $\rho$ , voi sisemmän pallovarauksen  $q_{\text{eff}}$  ilmoittaa tilavuuden  $V_r$  avulla:  $q_{\text{eff}} = V_r\rho = V_r\frac{q_2}{V_R}$ . Koska pallovaraus näkyy  $q_2$ :lle



**Kuva B.1** Pistevaraus  $q_2$  on  $R_{\text{QD}}$ -säteisen kvanttipisteen sisäpuolella. Varaukseen  $q_2$  kohdistuu voima ainoastaan kvanttipisteen harmaalla merkitystä osasta, joka on pallosymmetrinen. Osan kokonaisvaraus on  $q_{\text{eff}}$ , ja se näkyy  $q_2$ :lle yhtenä pistevarauksena.

pistevarauksena  $q_{eff}$ , on niiden välinen voima esitettävissä muodossa

$$\begin{aligned}
F &= k_\varepsilon \frac{q_2 q_{eff}}{r^2} \\
&= k_\varepsilon \frac{q_2}{r^2} (V_r \rho) \\
&= k_\varepsilon \frac{q_2}{r^2} \left( \left( \frac{4}{3} \pi r^3 \right) \left( \frac{q_1}{\frac{4}{3} \pi (R_{QD})^3} \right) \right) \\
&= k_\varepsilon \frac{q_1 q_2}{(R_{QD})^3} r.
\end{aligned} \tag{B.2}$$

Nyt tunnetaan kvanttipisteen ja pistevarauksen välinen voima  $F$  kaikilla etäisyyksillä  $r$ , jolloin potentiaalienergian  $V_{QD}$  voi selvittää integraalilla

$$V_{QD} = \int \vec{F} \cdot d\vec{r}. \tag{B.3}$$

Kun pistevaraus lähestyy kvanttipistettä äärettömän kaukaa, on potentiaali

$$V_{QD}(r) = \int_\infty^r -F(r) dr, \tag{B.4}$$

missä  $r = \infty$  on valittu potentiaalin nollakohdaksi. Kun  $r \geq R_{QD}$  eli  $q_2$  on kvanttipisteen ulkopuolella, käyttäytyy voima coulombisesti, eli  $F \propto \frac{1}{r^2}$ . Kvanttipisteen sisäpuolella taas vaikuttaa kaavan B.2 lineaarinen voima  $F \propto r$ . Potentiaali on paloittain ilmaistuna

$$\begin{aligned}
V_{QD}(r) &= \begin{cases} \int_\infty^r -k_\varepsilon \frac{q_1 q_2}{r^2} dr & \text{kun } r \geq R_{QD} \\ \int_\infty^{R_{QD}} -k_\varepsilon \frac{q_1 q_2}{r^2} dr + \int_{R_{QD}}^r -k_\varepsilon \frac{q_1 q_2}{(R_{QD})^3} r dr & \text{kun } r < R_{QD} \end{cases} \\
&= \begin{cases} -k_\varepsilon q_1 q_2 \left( \frac{-1}{r} \right) \Big|_\infty^r & \text{kun } r \geq R_{QD} \\ -k_\varepsilon q_1 q_2 \left( \frac{-1}{r} \right) \Big|_\infty^{R_{QD}} - k_\varepsilon \frac{q_1 q_2}{(R_{QD})^3} \left( \frac{1}{2} r^2 \right) \Big|_{R_{QD}}^r & \text{kun } r < R_{QD} \end{cases} \\
&= \begin{cases} -k_\varepsilon q_1 q_2 \left( \frac{-1}{r} - 0 \right) & \text{kun } r \geq R_{QD} \\ -k_\varepsilon q_1 q_2 \left( \frac{-1}{R_{QD}} - 0 \right) - k_\varepsilon \frac{q_1 q_2}{2(R_{QD})^3} (r^2 - (R_{QD})^2) & \text{kun } r < R_{QD}. \end{cases}
\end{aligned} \tag{B.5}$$

