

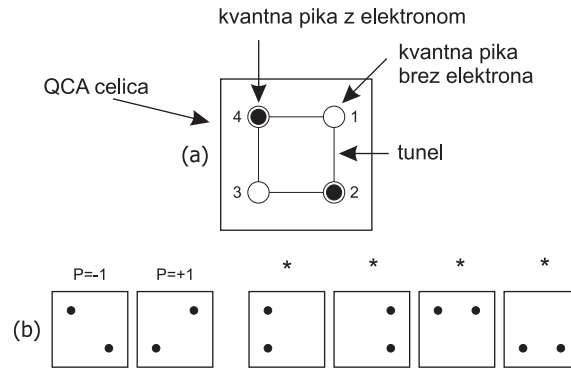
Poglavje 2

Kvantni celični avtomati

V pričujočem poglavju predstavimo zanimivo materialno - logično paradigmo procesnih struktur *kvantnih celičnih* (ali celularnih) *avtomatov* (angl. *quantum-dot cellular automata* - QCA). Delovanje procesne strukture temelji na zakonih kvantne fizike, katerih zakonitosti bomo povzeli le v mejah osnovnega razumevanja. Temelje QCA struktur je v začetku devetdesetih let prejšnjega stoletja postavil C. S. Lent s sodelavci [12, 13]. Lent v začetnih rešitvah predlaga planarne (dvodimenzionalne ali površinske) strukture sestavljene iz *kvantnih* ali QCA *celic*, kasneje pa se pojavijo tudi prostorske ali trodimenzionalne strukture sestavljene iz kvantnih celic. Del pričujočega poglavja je neposredno povzet po viru [14].

2.1 Arhitektura QCA celice

Temelj QCA strukture predstavlja *kvantna* ali QCA *celica*. Posamezna celica je povzeto po Lentu [12, 13] dvodimenzionalne površinske kvadratne oblike, pri čemer se pri vsakem oglišču kvadrata nahaja *kvantna pika* s pozitivnim nabojem. V celico sta ujeta dva elektrona, pri čemer se vsak od njiju lahko nahaja le v eni od štirih kvantnih pik. Sosednje kvantne pike povezujejo štirje tuneli, ki omogočajo prehajanje ali tuneliranje elektronov med posameznimi pozitivno nabitimi kvantnimi pikami. Razlog za prehajanje elektronov izhaja iz dejstva, da posamezni elektron glede na prisotnost odbojnih sil iz svoje okolice teži k prehodu v kvantno piko ali lego, ki maksimizira njegovo energetsko stabilno lego na osnovi Coulombovih fizikalnih zakonov [15]. Gibanje ali nahajanje elektronov izven tunelov ali pik je onemogočeno. Povedano drugače, elektron ima tendenco prehanja v kvantno piko, v kateri so odbojne sile med njim, elektroni iz okolja (elektroni iz sosednjih celic) in partnerskim elektronom - drugim elektronom v celici, minimalne. Na sliki 2.1(a) je predstavljena osnovna shema QCA kvantne celice z dvema elektronom, štirimi kvantnimi pikami in povezovalnimi tuneli. Če v celico postavimo dva elektrona in odbojne sile med njima preglasijo vpliv sil iz okolice (kar je odvisno od oddaljenosti QCA celic s pari elektronov v sosed-



Slika 2.1: Celica QCA s štirimi kvantnimi pikami in dvema elektronom (a) ter vse možne potencialne lege dveh elektronov v posamezni celici (b).

stvu), se elektrona postavita v eno od dveh diagonalnih leg, v katerih dosežeta maksimalno možno medsebojno oddaljenost in s tem posledično najstabilnejše energetske stanje. Z dvema elektronom in štirimi pozitivno nabitimi kvantnimi pikami v QCA celici tako dobimo sistem z dvema stabilnima *polariziranimi* stanjema. Na sliki 2.1(b) so predstavljene vse možne fizične lege elektronov, pri čemer sta ob homogeni površinski porazdelitvi celic in ustrezni razdalji med njimi polarizirani legi elektronov označeni z $P = -1$ in $P = +1$ mogoči, nepolarizirane lege elektronov označene z $*$ pa nemogoče. Lent mogoči stanji $P = -1$ in $P = +1$ interpretira kot logični vrednosti 0 in 1, ki smo jih vajeni iz dvojiške logike in dvostanjskih digitalnih sistemov. Odtod lego elektronov interpretiramo kot *logično stanje* posamezne celice.

Posamezna QCA celica se tako lahko nahaja v enem od dveh možnih energetske stabilnih stanj, ki sta pogojeni z lego elektronov. V zadnjih dvajsetih letih se je na osnovi struktur sestavljenih iz QCA celic razvil poln dvojiški funkcijski nabor, ki vsebuje logične funkcije konjunkcije, disjunkcije in negacije [16], razvije pa se tudi referenčno programsko orodje QCADesigner za postavljanje modelov in simulacijo dinamike kompleksnejših preklonnih funkcij [17]. S pomočjo referenčnega programskega orodja so bili zgrajeni kompleksnejše QCA strukture kot so seštevalniki, množilniki, ALU enota, 4-bitni procesor itd.

Fizične realizacije QCA celic imajo danes sledeče karakteristike:

- razdalje med pikami v QCA celici so velikostnega razreda nekaj nm ,
- velikost posamezne pike je velikostnega razreda nekaj nm ,
- razdalje med sosednjimi pikami v sosednjih celicah so velikostnega razreda nekaj nm ;

2.2 Matematične zakonitosti izračuna stabilnega stanja QCA celice

Matematične zakonitosti izračuna stabilnega stanja QCA celice si oglejmo najprej na zgledu posamezne, od zunanjih vplivov (sil) izolirane celice. V tem primeru sta legi elektronov označeni z $P = -1$ in $P = +1$ enako verjetni, kar pomeni, da je celica nevtralna in opazovana od zunaj ne izkazuje nikakršnega potenciala - naboja. Tako z vidika modela, kot tudi fizičnih realizacij, slednje dosežemo tako, da kvantnim pikam priredimo pozitivni električni naboj $\frac{n * e}{m}$ [12, 18], kjer je m število kvantnih pik v celici, n število elektronov in e naboj elektrona (pri Lentovi kvantni celici je $m = 4$ in $n = 2$). Kvantni piki, v katerih se nahaja elektron, imata torej naboj $\frac{n * e}{m} - e$, kar pomeni, da je vsota nabojev kvantnih pik znotraj ene celice enaka 0 ter da sta stanji $P = -1$ in $P = +1$ energetske enakovredni.

Množico vseh QCA celic v dvo ali trodimenzionalni QCA strukturi lahko opazujemo s stališča celotne elektrostatične potencialne energije [?], ki se izračuna kot energija sistema točkastih nabojev na osnovi izraza

$$E = \sum_{i \neq j} \frac{\rho_i \rho_j}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r r_{ij}}, \quad (2.1)$$

kjer je ρ_i naboj kvantne pike i , r_{ij} razdalja med kvantnima pikama i in j , ϵ_0 permitivnost vakuumu in ϵ_r relativna permitivnost medija. V modelih struktur običajno privzamemo konstante na osnovi izvedbe v GaAs/AlGaAs tehnologiji. Z izračunom elektrostatične potencialne energije za vse mogoče kombinacije leg elektronov določimo tisto, ki privede do energijsko minimalnega stanja. Seveda je tak izračun procesno in s tem tudi časovno zelo potraten, saj je za množico k celic, kjer ima vsaka m kvantnih pik in n elektronov, treba pregledati in izračunati energetska stanja $\binom{m}{n}^k$ mogočih kombinacij leg elektronov.

2.3 Strukture QCA celic

V predhodnih razdelkih smo definirali arhitekturo posamezne QCA celice in zakonitosti njene dinamike. Osnovna ideja gradnje struktur celic izhaja iz njihovega razporejanja s ciljem doseganja izvedbe željene dinamike preklapljanja med legami elektronov v opazovanih ciljnih celicah. Običajno se pri snovanju QCA struktur zatekamo k homogenim porazdelitvam celic v dvo ali trodimenzionalnem prostoru. Posamezne celice v homogenem prostoru lahko sicer manjkajo, a razporeditev preostalih celic naj bi bila vsaj do neke mere homogena. Posamezno celico v strukturi lahko smatramo za *avtomat*, ki glede na vplive okolja (vhodne logične vrednosti) preklaplja med dvema stabilnim stanjema (logičnima vrednostima 0 in 1). QCA celice, ki tvorijo QCA strukture, delimo v tri skupine:

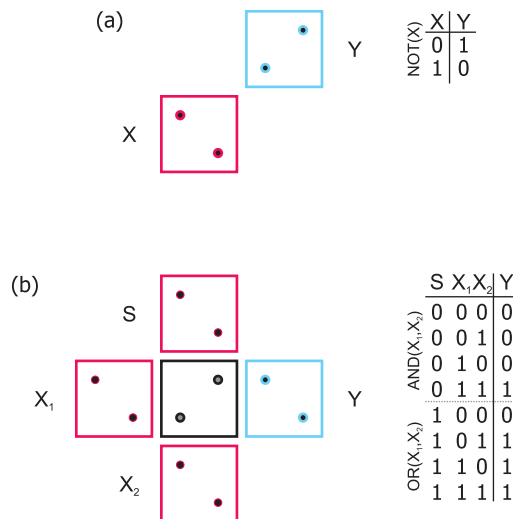
- *vhodne celice*: v njih se pod vplivom zunanjih sil prisilno doseže zelena polarizacija ali razporeditev elektronov; tovrstnega stanja ni mogoče porušiti s strani vplivov sosednjih celic, zato takšne celice imenujemo tudi

za gonilnike (angl. *drivers*); na slikah v nadaljevanju pričujočega poglavja so tovrstne celice predstavljene z rdečo barvo;

- *notranje ali procesne celice*: v njih se izvede polarizacija - prehajanje ali tuneliranje elektronov v stabilno lego ali logična 'obdelava' vhodnih dvojiških podatkov; na slikah v nadaljevanju pričujočega poglavja so tovrstne celice predstavljene s črno barvo;
- *izhodne celice*: njihovo stanje po ustreznem časovnem zamiku obravnavamo kot rezultat procesiranja; na slikah v nadaljevanju pričujočega poglavja so tovrstne celice predstavljene z modro barvo.

2.4 Osnovni gradniki za dvovrednostno procesiranje v QCA strukturah

V devetdesetih letih prejšnjega stoletja skupina raziskovalcev, ki jo vodi Lent, postavi prve QCA logične strukture [12], katerih dinamika sovпада s polnim naborom logičnih funkcij AND, OR, NOT. Njihova rešitev ni zanimiva samo z vidika možnosti realizacije poljubne dvojiške preklonpe funkcije, temveč tudi zato, ker funkciji AND in OR realizira v obliki dvojiške *večinske* ali *majoritetne* funkcije. Na sliki 2.2(a) je predstavljena najpreprostejša struktura za izvedbo logične funkcije NOT, na sliki 2.2(b) pa struktura majoritetnih vrat za izvedbo logičnih funkcij AND in OR. Celice X, X₁ in X₂ predstavljajo vhodne celice,



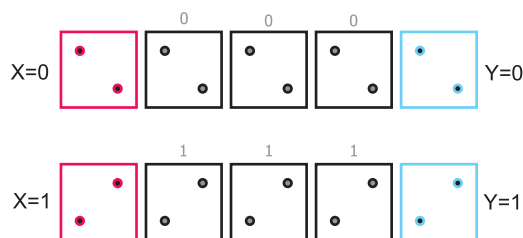
Slika 2.2: Realizacija dvojiške logične funkcije NOT (a) ter dvojiških logičnih funkcij AND in OR (b).

prek katerih vstopajo vrednosti vhodnih logičnih spremenljivk, celica S vhodno

celico, ki izbira med izvedbo OR ($S=1$) ali AND ($S=0$) funkcije, celica Y pa predstavlja izhodno celico, iz katere odčitamo rezultat logične operacije nad spremenljivkami X , X_1 in X_2 . Lege celic S , X_1 in X_2 v majoritetnih vratih lahko med seboj zamenjamo. Logično funkcijo majoritetnih vrat lahko zapišemo tudi z izrazom

$$y = x_1x_2 \vee x_2S \vee x_1S. \quad (2.2)$$

Poleg struktur za implementacijo polnega nabora logičnih funkcij Lent predstavi tudi QCA strukturo za prenos podatkov. Poimenuje jo za *žico* (ang. *wire*), ki vrši funkcijo vodila za prenos podatkov. Predstavljena je na sliki 2.3 in omogoča propagacijo vrednosti logičnih spremenljivk.



Slika 2.3: Realizacija prenosa dvojiške logične vrednosti po žici ali QCA vodilu.

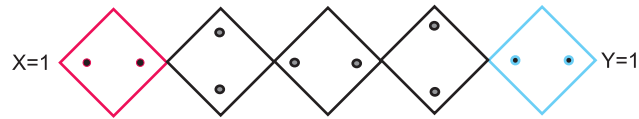
Osnovne značilnosti poljubnega računalniškega sistema so zmožnosti procesiranja (izdelave decizije), prenašanja podatkov in pomnjenja [19]. Glede na povedano so strukture QCA sposobne tako procesiranja, kot tudi prenašanja logičnih vrednosti. Kaj pa je s pomnjenjem? Ob predpostavki, da na elektrona v celici ne vplivajo zunanje sile, le-ta ne preideta v neko trajno stabilno stanje, temveč lahko med obema stabilnema stanjema ves čas prehajata na osnovi kvantnih zakonov. Tako celice ob danih predpostavkah o vseskozni možnosti prehajanja ne moremo smatrati kot pomnilni element.

2.5 Dodatni zanimivi QCA gradniki

Doslej smo spoznali logična gradnika majoritetnih vrat in negacije ter vodilo za prenos podatkov. Poleg njih obstaja še množica drugih gradnikov ali konceptov struktur, ki nam odpirajo nove možnosti za gradnjo logičnih vezij.

2.5.1 Alternirajoče vodilo

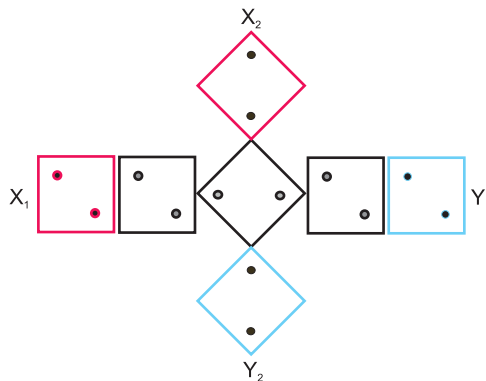
Na sliki 2.4 je predstavljen koncept strukture QCA vodila, v katerem se odmaknemo od homogenosti strukture in celice v vodilu rotiramo za 45 stopinj. V takšni strukturi vrednosti logičnih spremenljivk po vodilu alternirajo. Če hočemo takšno strukturo uporabljati v funkciji vodila, moramo branje logične vrednosti izvajati na lihih celicah v zaporedju strukture, na sodih celicah pa lahko zajemamo negirano vrednost.



Slika 2.4: Struktura alternirajočega vodila.

2.5.2 Brezizgubno križanje vodil

Naslednji zanimiv koncept prinaša struktura, ki omogoča brezizgubno križanje vodil, predstavljena na sliki 2.5. Sestavljena je iz križanja običajnega vodila z alternirajočim. Brezizgubnost logičnih vrednosti velja za vse štiri možne kombinacije vstopajočih logičnih vrednosti X_1 in X_2 .



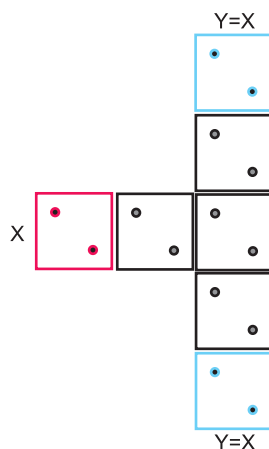
Slika 2.5: Struktura brezizgubnega križanja vodil.

2.5.3 Razmnoževanje nosilca logičnega signala

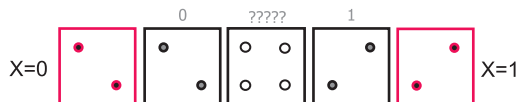
Na sliki 2.6 je predstavljena struktura za razmnoževanje nosilca signala (angl. *fan-out*), ki je pri gradnji kompleksnejših logičnih vezij nepogrešljiva. Realiziramo jo z 90 stopinjskim razvejiščem nam že poznanega vodila.

2.6 Vpeljava ure v QCA strukture

Predpostavimo, da imamo opravka z vodilom, kjer na obeh njegovih koncih postavimo vhodni celici ali gonilnika z dvema različnima logičnima vrednostima (omenjeni primer je prikazan na sliki 2.7). Notranje celice se bodo pod vplivom gonilnikov iz robnih strani proti sredini postopoma polarizirale, v sredini linije pa bo prišlo do konflikta ali „trčenja“ dveh podatkovnih vrednosti. Omenjeni



Slika 2.6: Struktura razmnoževanja nosilca signala.



Slika 2.7: Primer konflikta ali „trčenja“ dveh podatkovnih vrednosti.

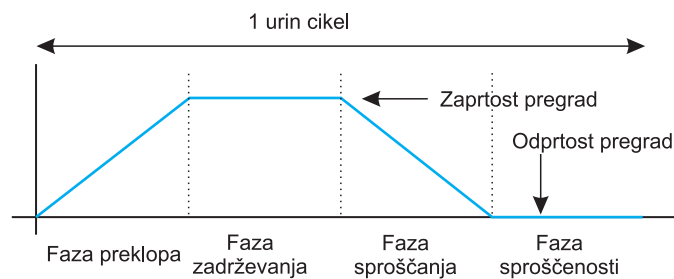
problem razrešimo z „usmerjanjem“ toka procesiranja z vpeljavo ure [20]. Slednje izvedemo tako, da začasno zaklepamo dinamiko v posameznih notranjih celicah, s čimer je prehajanje elektronov v teh celicah v stabilne lege začasno onemogočeno. Časovni signal ne vstopa neposredno do posamezne celice, temveč posredno, realiziran pa je v obliki električnega polja, ki deluje nad določenim četverkotnim področjem celic.

Vpeljana ura, ki definira zaklepanje in odklepanje celic (zapiranje in odpiranje pregrad med tuneli, po katerih prehajajo elektroni), je sestavljena iz štirih faz in sicer faz **Switch**, **Hold**, **Release** in **Relax**, ki so natančneje opisane v viru [20]. Posamezne faze imajo sledeči pomen:

- **Switch** faza ali faza preklopa: v tej fazi se pregrade med tuneli zapirajo in celice iz nepolariziranih stanj prehajajo v polarizirana;
- **Hold** faza ali faza zadrževanja: v tej fazi so pregrade med tuneli zaprte in celice ostajajo v predhodno doseženih polariziranih stanjih; celice ne morejo preiti v neko drugo polarizirano stanje - so zaklenjene; s tem tovrstne celice začasno prevzemajo vlogo gonilnikov;
- **Release** faza ali faza sproščanja: v tej fazi se pregrade med tuneli odpirajo in elektroni začnejo prehajati med pikami;

- Relax faza ali faza sproščenosti: v tej fazi so pregrade med tuneli odprte in celice so proste - lahko prihaja do sprememb polarizacije posamezne celice;

Vse štiri opisane faze, skozi katere kroži vsaka notranja ali izhodna celica, tvorijo eno urino periodo. Že predhodno smo poudarili, da posamezna faza urine periode običajno ne glasi na posamezno celico, temveč na večje število sosednjih celic. Grafično ponazoritev štirih urinih faz najdemo na sliki 2.8. Po vpeljavi ure govorimo o časovno nadzorovanem ali adiabatnem preklapljanju v QCA strukturah. Običajno prostor celic QCA strukture razdelimo na posame-



Slika 2.8: Grafična ponazoritev štirih časovnih faz ali enega urinega cikla.

zna *urina področja*, tako da si vse QCA celice v istem področju delijo isto fazo ure. Fizično sosednji področji QCA celic sta vedno v sosednjih urinih fazah.

Z vpeljavo ure smo dosegli sekvenčnost izvajanja logičnih funkcij (diktiranje vrstnega reda izvajanja operacij) in v nekaterih primerih tudi ojačevanje signala, kar dosežemo v fazi zadrževanja.

2.7 Programsko okolje za simuliranje delovanja QCA struktur

Eden od razlogov za veliko popularnost področja razvoja QCA struktur izhaja iz dejstva, da je za postavljanje modelov struktur in simulacijo njihove dinamike na razpolago brezplačno programsko razvojno orodje QCADesigner. Njegov avtor je K. Walus. Navkljub temu, da je orodje za uporabo okorno in v kontekstu grafičnega vmesnika zastarelo, vrši vlogo referenčnega orodja in se QCA strukture, katerih delovanje preverimo v QCADesignerju, smatrajo kot verificirane ali delujoče.

2.8 Povzetek poglavja

QCA strukture kot tipičen primer *robno gnanega procesiranja* (angl. *edge driven computation*) se v zadnjih dvajsetih letih ves čas izpostavljajo kot možna

alternativa CMOS strukturam. Različne fizične realizacije dokazujejo, da bi tovrstne strukture bile manj energetske potratne, dosegale bi hitrejše preklapljanje (hitrejši takt ure), ponujajo možnost površinskega križanja vodil itd. Ključni problem, ki je trenutno v fazi reševanja, so relativno majhne razlike med energijami polariziranih in nepolariziranih stanj v celicah, kar pomeni, da je pravilno delovanje tovrstnih struktur zelo izpostavljeno vplivu okolja ali šumu (npr. ambientalni temperaturi procesiranja).

Študentom v dodatno branje o QCA strukturah priporočam naslednje vire:

- T.Orač - diplomsko delo na FRI, 2007 (glej spletno učilnico): v delu najdemo natančneje opisane osnove QCA celic in struktur, uporabo orodja QCADesigner in kar nekaj realizacij kompleksnejših QCA struktur;
- M.Janež - doktorska disertacija na FRI, 2012 (glej spletno učilnico): v delu je opisana raziskava določanja urinih področij na osnovi metode simuliranega ohlajanja;
- J.Virant - Načrtovanje nanoračunalniških struktur, knjiga iz l.2007 izdana v slovenskem jeziku s strani založnika Didakta d.o.o. (knjiga je na voljo v knjižnici FRI);

Literatura

- [1] “The scale of things.” <http://science.energy.gov/bes/community-resources/scale-of-things-chart/>, September 2016.
- [2] M. Hak, *The MEMS Handbook*. CRC Press, 2002.
- [3] M. Mack, “The multiple lives of Moore’s law,” *IEEE Spectrum*, vol. 4, pp. 29–35, 2015.
- [4] D. Kodek, *Arhitektura in organizacija računalniških sistemov*. Bi-Tim, Slovenija, 2008.
- [5] *From editors of Scientific American: Understanding nanotechnology*. Warner Books, ZDA, 2002.
- [6] “2001: A Space Odyssey,” 1968.
- [7] A. Adamatzky, B. Costello, and T. Asai, *Reaction diffusion computers*. Elsevier, 2005.
- [8] B. Hayes, “Third base,” *American Scientist*, vol. 89, no. 6, 2001.
- [9] W. Aspray, *John Von Neumann and The Origins Of Modern Computing*. The MIT Press, England, 1990.
- [10] “There’s Plenty of Room at the Bottom.” https://en.wikipedia.org/wiki/There%27s_Plenty_of_Room_at_the_Bottom/, September 2016.
- [11] E. Regis, *Nano – the emerging science of nanotechnology*. BackBay Books, 1995.
- [12] C. Lent, P. Tougaw, W. Porod, and G. Bernstein, “Quantum cellular automata,” *Nanotechnology*, vol. 4, 1993.
- [13] C. Lent and P. Tougaw, “Lines of interacting quantum-dot cells: a binary wire,” *Journal of Applied Physics*, vol. 74, 1993.
- [14] I. L. Bajec and M. Mraz, “Večstanjsko procesiranje v strukturah kvantnih celičnih avtomatov,” *Elektrotehniški vestnik*, vol. 73, no. 2-3, 2006.

-
- [15] P. Pečar, “Uporaba adiabatsnega pristopa pri realizaciji trojiškega procesiranja na osnovi kvantnih celičnih avtomatov,” Master’s thesis, Faculty of computer and Information science, University of Ljubljana, 2007.
 - [16] G. Snider, A. Orlov, I. Amlani, and G. Bernstein, “Quantum-dot cellular automata: line and majority logic gate,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 38, 1999.
 - [17] K. Walus, T. Dysart, G. Jullien, and R. Budiman, “Qcadesigner: a rapid design and simulation tool for quantum dots cellular automata,” *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 3, 2004.
 - [18] T. Cole and J. Lusth, “Quantum-dot cellular automata,” *Progress in Quantum Electronics*, vol. 25, 2001.
 - [19] Z. Kohavi, *Switching and finite automata theory*. McGraw-Hill Inc., USA, 1978.
 - [20] M. Niemier and P. Kogge, *Nano, Quantum and Molecular Computing - Implications to High Level Design and Validation*, ch. Origins and Motivations for Design Rules in QCA. Kluwer Academic Publishers, Boston, 2004.