

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za računalništvo in informatiko

Primož Pečar

**Uporaba adiabatnega pristopa pri realizaciji
trojiškega procesiranja na osnovi kvantnih
celičnih avtomatov**

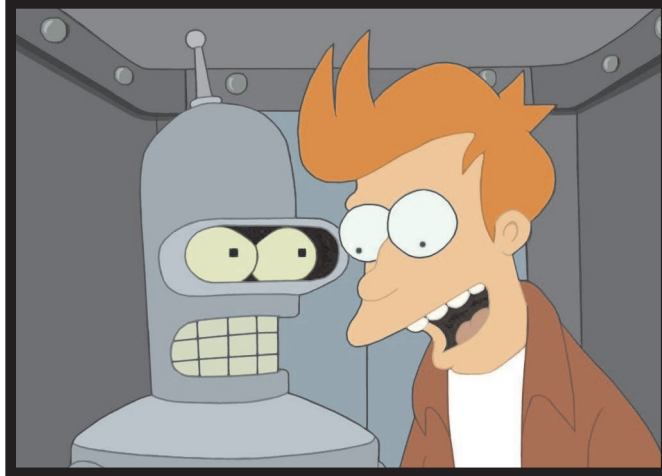
MAGISTRSKA NALOGA

prof. dr. Miha Mraz
MENTOR

doc. dr. Iztok Lebar Bajec
SOMENTOR

Ljubljana, 2007

za Alenko in Jerneja



“Ahhh, what an awful dream. Ones and zeroes everywhere... and I thought I saw a two.”

“It was just a dream, Bender. There is no such thing as two.”

— Bender and Fry, *Futurama*, 1999.

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za računalništvo in informatiko

Primož Pečar

Uporaba adiabatskega pristopa pri realizaciji trojiškega procesiranja na osnovi kvantnih celičnih avtomatov

POVZETEK

Kvantni celični avtomati (QCA) so ena od obetavnejših alternativ za procesne platforme prihodnosti. Temelje procesiranja na njihovi osnovi je postavil C. S. Lent s sodelavci na začetku prejšnjega desetletja. Temu je sledil razvoj QCA struktur, ki so realizirale funkcijsko poln nabor dvojiških logičnih funkcij negacije, konjunkcije in disjunkcije, ter tako omogočile gradnjo kompleksnejših dvojiških procesnih struktur.

Kljub temu se moramo zavedati, da je uporaba dvojiške logike, kot osnove računalniških struktur, le posledica tehnoloških omejitev, s katerimi so se snovalci srečevali v preteklosti. Tako je Lebar Bajec s sodelavci na osnovi teze, da procesne platforme prihodnosti ne bi smele zanemariti prednosti implementacije in uporabe večvrednostne logike, pokazal na možnost uporabe QCA platforme za podporo trojiški logiki. Osnovno idejo dvojiške QCA celice, kot planarnega gradnika sestavljenega iz štirih kvantnih pik, med katerimi lahko tunelirata dva elektrona, je razširil z dodatnimi štirimi kvantnimi pikami. Predlagana celica omogoča namesto dveh štiri energijsko ekvivalentne razporeditve elektronov in s tem štiri možna stanja. Dve stanji sta enaki stanjema Lentove dvojiške celice, drugi dve pa predstavljata tretjo logično vrednost. Strukturo, ki temelji na opisani celici, je Lebar Bajec poimenoval trojiški kvantni celični avtomat (tQCA). Iz tega izhaja tudi poimenovanje nove celice kot trojiške QCA celice oz. krajše tQCA celice. Avtorji so pokazali, da strukturi linije in delno negatorja ohranita funkcionalnost le z zamenjavo osnovnega gradnika (dvojiške QCA celice s trojiško) ter ustrezata Lukasiewiczovi trojiški logiki. To pa ni veljalo za osnovno geometrijo strukture, ki realizira trojiški logični operaciji konjunkcije in disjunkcije. Omenjeni problem so avtorji rešili z nadgradnjo strukture, ki s stališča prostorske zahtevnosti ni najbolj ugodna, saj se velikost logičnih vrat, če ne upoštevamo potrebnih medsebojnih povezav, poveča vsaj za trikrat. Tudi uporaba vhodov ni več tako fleksibilna, kot v primeru dvojiških logičnih vrat. Večja kompleksnost

predlagane strukture je pomenila eno glavnih motivacij za pričujoče delo.

V magistrski nalogi predstavimo primer odprave nastalih problemov tQCA logičnih struktur na osnovi pristopa adiabatskega preklapljanja. Njegova izbira je izhajala iz prednosti, ki so jih predstavili raziskovalci v okviru dvojiških QCA struktur. Bistveni dve sta povečanje stabilnosti delovanja QCA in poenostavitev gradnje pomnilnih QCA struktur. Pristop temelji na kvantno mehanski različici teorema adiabatskega. Ta pravi, da izvedba postopnega in dovolj počasnega preklopa sistema med dvema energijsko minimalnima stanjema zagotavlja, da sistem ves čas preklopa ostaja v trenutnem energijskem minimalnem stanju. V primeru QCA opisanemu teoremu zadostimo s kontrolo tuneliranja elektronov med kvantnimi pikami v posamezni celici. V ta namen smo morali vpeljati nov fizikalni simulacijski model tQCA celice. Polklasični model, ki ga je uporabil Lebar Bajec, je realizacijsko enostaven in omogoča oceno funkcionalnosti tQCA struktur, na žalost pa ne upošteva dovolj natančno kvantno mehanskih lastnosti celice. Te so zajete v posplošenem Hubbardovem modelu, ki tako omogoča vključitev omenjenega pristopa. Kontrolna ura je ciklični signal sestavljen iz štirih enako dolgih faz. Upošteva to dejstvo lahko poljubno QCA strukturo razdelimo na več delov oz. podsistemov, ki jih kontrolirajo največ štirje urini signali, med katerimi je četrtinski fazni zamik. Na ta način uvedemo sinhronizacijo prenosa podatkov med QCA celicami, kar omogoči cevovodno obnašanje QCA struktur. Sledeč temu principu lahko rešimo probleme osnovnih geometrij tQCA struktur, ki realizirajo trojiško kotno ter razvejitveno linijo, trojiški negator s poljubno dolgim vhodnim oz. izhodnim delom in trojiški logični operaciji konjunkcije ter disjunkcije. Še več, zadnja izmed omenjenih struktur je po velikosti enaka dvojiškemu ekvivalentu in omogoča fleksibilno uporabo vhodov. Opisane strukture lahko služijo kot gradniki tako dvojiških kot tudi trojiških procesnih platform ali pa celo hibridov, ki bi združevali dobre lastnosti obeh.

Ključne besede: kvantni celični avtomat, polklasični model, posplošeni Hubbardov model, Hartreejeva aproksimacija, adiabatski preklop, trojiško procesiranje

University of Ljubljana
Faculty of Computer and Information Science

Primož Pečar

Application of adiabatic switching to the implementation of ternary processing based on Quantum-dot Cellular Automata

ABSTRACT

Quantum-dot cellular automata (QCA) are one of the most promising alternative processing platforms of the future. They were introduced by C. S. Lent et al. in the mid 1990s. What followed was an exhilarating period with the development of QCA structures that implement the functionally complete set of binary logic operations (inverse, disjunction, conjunction). This allowed the construction of the first more complex processing structures.

Regardless of the achievements, one needs to acknowledge that the use of binary logic, as the basis of all computer structures, is mainly the end result of the technological limitations, which the designers had to cope with in the early days of computer structures and systems research. This is why Lebar Bajec et al., based on the argument that processing platforms of the future should not disregard the clear advantages of multivalued logic, presented a possible approach to using the QCA platform for ternary logic. In their approach they take the binary QCA cell (the basic building block of any QCA) that consists of four quantum-dots between which two electrons can tunnel, and extend it with four additional quantum dots. The new cell has four instead of two energetically equivalent distributions of the two electrons. Two of them are equal to the ones in the binary QCA cell, whereas two are different and employed to represent the third logic value. The authors denote the new cell as the ternary QCA or tQCA cell and show that, by swapping the binary QCA cell with the ternary QCA cell, the QCA wire and QCA inverter structures retain their functionality, but now in the realm of ternary logic. This was, however, not true for the majority gate structure (the structure used to implement the operations of binary disjunction and conjunction). They do present a possible solution, but from the viewpoint of space requirement not a very encouraging one. Indeed, when compared with the binary counterpart the space requirement is more than tripled.

What is more, their solution limits the flexibility of the input selection. This and the increase in complexity are the principal motivators of this research.

In this thesis we present a solution that is based on the adiabatic switching approach. Its selection originates from the advantages presented by the researchers of binary QCA structures. The principal two are the increased processing stability and simplification of the design of memory structures. The approach is based on the quantum mechanics version of the adiabatic theorem, which states that a slow enough switch asserts that the system is in its ground state throughout the whole period of the switch. In QCA structures this is achieved by controlling the tunnelling energies between individual quantum dots. Due to this, the ternary QCA cell was first re-formalized using the quantum mechanics based Hubbard model, as the semi-classical model, used by Lebar Bajec, did not allow the inclusion of adiabatic switching. The tunneling energies are controlled by means of a cyclic signal consisting of four phases of equal length. By taking this into account, an arbitrary QCA structure can be decomposed into multiple parts controlled by four distinct phase shifted signals. This allows the introduction of the synchronization of data transfer between cells and allows us to solve the problems of the corner and fan-out wire, as well as the problems of the structures that implement the operations of ternary inverse (with an arbitrary long input/output section), ternary disjunction and conjunction. What is more, the geometry of the structure that implements ternary disjunction and conjunction equals the one employed for the implementation of the binary operations and thus can behave as binary or as ternary logic gate.

Key words: quantum-dot cellular automaton, semiclassical model, extended Hubbard model, Hartree approximation, adiabatic switching, ternary processing

ZAHVALA

Zahvaljujem se vsem, ki so mi na kakršnikoli način pomagali pri izdelavi pričujočega dela: mentorju prof. dr. Mihi Mrazu za strokovno vodenje, somentorju doc. dr. Iztoku Lebarju Bajcu za nesebično pomoč, konstruktivne napotke in potrpljenje, ki ga je izkazal v dolgih urah diskusij, prof. dr. Antonu Ramšaku, brez katerega bi bila moja pot v kvantno mehaniko veliko bolj trnova ter ostalim sodelavcem v Laboratoriju za računalniške strukture in sisteme. Hvala tudi tebi Alenka za pomoč, potrpljenje in podporo.

— Primož Pečar, Ljubljana, September 2007.

KAZALO

Povzetek	v
Abstract	vii
Zahvala	ix
1 Uvod	1
1.1 Motivacija	1
1.2 Metodologija	4
1.3 Pregled dela	4
1.4 Notacija	4
2 Kvantni celični avtomat	7
2.1 Celica s kvantnimi pikami	7
2.2 Simetrična nevtralizacija naboja	10
2.3 Polarizacija	11
2.4 Model procesiranja	13
2.5 Dvojiške strukture	16
2.5.1 Linija	16
2.5.2 Operacija negacije	19
2.5.3 Operacija konjunkcije in disjunkcije	19
3 Kontrola prenosa podatkov	21
3.1 Grobo preklapljanje	21
3.2 Adiabatno preklapljanje	23

4 Modeliranje QCA	29
4.1 Polklasični model	29
4.2 Posplošeni Hubbardov model	31
4.2.1 Diracova notacija	31
4.2.2 Izolirana celica	35
4.2.3 Interakcija med celicami	40
4.2.4 Medcelična Hartreejeva aproksimacija	42
4.2.5 Vpeljava adiabatsnosti	44
5 Trojiški QCA	47
5.1 Razširitev dvojiške QCA celice	47
5.2 Problem osnovne definicije polarizacije	51
5.2.1 Trojiška polarizacija	52
5.2.2 Stopnja ujemanja z željenim stanjem	53
5.3 Osnovne procesne strukture	54
5.3.1 Vpliv tunelirne energije	54
5.3.2 Prevajalna funkcija interakcije dveh celic	55
5.3.3 Linija	58
5.3.4 Operacija negacije	60
5.3.5 Operacija konjunkcije in disjunkcije	61
5.4 Uporaba adiabatsnega modela	65
6 Zaključek	73
Literatura	77

1 Uvod

1.1 Motivacija

Nenehno zmanjševanje velikosti tranzistorjev, kot osnovnih gradnikov CMOS tehnologije, ki smo mu v mikroelektroniki priča zadnjih petdeset let, je privedlo do hitrejših in gostejših procesnih struktur. Ne glede na to, kako dramatičen je bil tehnološki napredek, najmodernejša integrirana vezja še vedno slonijo na istih osnovah kot njihovi predhodniki. Zato se že dalj časa kažejo teoretične in tehnološke omejitve, ki bodo prej ali slej zavrle nadaljnje izboljšave [1]. Najbolj očitni tehnološki omejitvi sta problem disipacije toplote in problem povezovanja osnovnih gradnikov. Pri veliki gostoti tranzistorjev in veliki hitrosti preklopov toplote, proizvedene med preklopnim ciklom, ne moremo dovolj hitro odvesti, kar zvišuje temperaturo delovanja naprave in s tem nivo šuma ter posledično znižuje njeno zmogljivost. Poleg tega tudi povezovanje osnovnih gradnikov postaja vse bolj problematično, saj kovinskih povezav ne moremo manjšati z enakim tempom, kot manjšamo velikost tranzistorjev. Število slednjih z gostoto nenehno narašča, kar zahteva kompleksno gradnjo integriranih vezij v več nivojih. Teoretične meje postanejo očitne, ko osnovni gradniki preidejo na red velikostni nanometra. Ta namreč sovпада z velikostnim

redom molekul in atomov. V tem območju začnejo kvantni učinki močno vplivati na obnašanje osnovnega gradnika, česar pa dosedanja tehnologija ni obvladovala oz. se je temu poskušala izogniti [1–3].

Nanotehnologija, kot veda, ki se ukvarja s proučevanjem in manipulacijo delcev nanometrskih velikosti, ponuja alternativen pristop. Namesto, da skušamo izničiti ali obiti kvantne učinke, ki se porajajo z zmanjševanjem velikosti osnovnih gradnikov, raje dane učinke izkoristimo [4]. Kljub temu bi morale novo nastale alternativne procesne platforme pri tem zadoščati naslednjim pogojem: z vidika prenosljivosti, zmogljivosti in zanesljivosti bi morale omogočati neposreden prehod s tranzistorske procesne platforme, biti bi morale varčnejše z energetskega vidika, omogočati bi morale naknadno povečevanje procesne hitrosti, obenem pa procesiranje na platformi zaradi morebitne energetske samozadostnosti ne bi smelo uiti izpod nadzora [5].

Eden od pristopov, ki po virih dosega tako željene prenosljivostne ter zmogljivostne parametre, kot tudi obljublja rešitev problema povezovanja in problema disipacije toplote, ter tako omogoča gradnjo izredno gostih in izredno hitrih procesnih platform, je kvantni celični avtomat (angl. *Quantum Cellular Automaton* – QCA). Osnovno idejo je konec osemdesetih let prejšnjega stoletja podal Bate [6], njeno implementacijo pa izvedel C. S. Lent s sodelavci v začetku prejšnjega desetletja [7].

Tranzistor, osnovni gradnik današnjih računalniških sistemov, je rezultat razvoja, ki izhaja iz ene najbolj plodnih idej dvajsetega stoletja. Ta predvideva uporabo dvojiških števil za predstavitev informacije in njihovo izvedbo s pomočjo dvostanjskega tokovnega stikala. Vendar dvojiški sistem ni vsemogočen, kar so hitro spoznali že računalniški pionirji v petdesetih letih prejšnjega stoletja. Večvrednostni logični sistem, kot poplošitev dvojiškega, je v tem smislu ponujal alternativo, kar je privedlo do poskusov izdelave večvrednostnih računalnikov. Na žalost so ti zaradi nezmožnosti realizacije večvrednostnih osnovnih gradnikov, ki bi po enostavnosti lahko parirali dvostanjskemu stikalu, vsi klavrno propadli [8, 9]. Torej je uporaba dvojiške logike, kot osnove računalniških struktur, le posledica tehnoloških omejitev, s katerimi so se snovalci srečevali v preteklosti. Temu toku se je priključil tudi Lent, saj je osnovni gradnik razvil kot neposreden nadomestek današnjih tranzistorjev. Tako imenovana QCA celica z dvema energetsko ekvivalentnima stanjema izkazuje izrazito bistabilno obnašanje. Tako se je večina raziskovalcev omejila le na raziskavo dvojiških QCA struktur z namenom, da bi postale nadomestek dosedanjih CMOS integriranih vezij. V zadnjih desetih letih se je s

QCA strukturami implementiral poln dvojiški funkcijski nabor, ki je omogočal izdelavo kompleksnejših procesnih in pomnilnih gradnikov [10–13].

Kljub prevladi dvojiške logike pa procesne platforme prihodnosti ne smejo zanemariti možnosti implementacije in uporabe večvrednostne logike [14]. Prednosti njene uporabe se kažejo v večjih pomnilnih sposobnostih, hitrejših aritmetičnih operacijah, boljši podpori odločanju, numerični analizi, nedeterminističnim in hevrističnim proceduram, komunikacijskim protokolom ter reševanju problemov, ki po svoji naravi niso dvojiški [9, 14–23].

Trojiška logika je najenostavnejša iz množice večvrednostnih logik, poleg tega pa trojiški številčni sistem glede na produkt velikosti baze in dolžine zapisa števila predstavlja najbolj ekonomičen način predstavitve števil [22]. Tako trojiški sistem predstavlja dokaj naravno izbiro za raziskave večvrednostne logike. Lebar Bajec je v [24] skupaj s sodelavci pokazal, da je QCA celica primerna platforma za podporo trojiški logiki. Osnovno geometrijo dvojiške celice je ob predpostavki, da ne obstajajo tehnološke omejitve, razširil tako, da nova celica omogoča namesto dveh štiri energetsko ekvivalentna stanja. Dve stanji sta enaki stanjema Lentove dvojiške celice, drugi dve pa je avtor uporabil za predstavitev tretje logične vrednosti. Avtor je tudi pokazal, da strukturi linije in delno negatorja ohranita celotno funkcionalnost le z zamenjavo osnovnega gradnika (dvojiške QCA celice s trojiško QCA celico) ter ustrezata trojiški logiki. Na žalost pa se je osnovna geometrija strukture, ki realizira trojiška IN ter ALI logična vrata, izkazala za veliko bolj problematično. Rešitev, ki jo je predlagal Lebar Bajec, je najmanj za trikrat povečala velikost gradnika glede na njegov dvojiški ekvivalent [25]. To pa vnaša skrb, da bo nova procesna platforma, kljub trojiškemu obnašanju osnovnih gradnikov (QCA celic) predvsem zaradi kompleksnosti najenostavnejših logičnih vrat, ki služijo kot gradniki aritmetično-logičnih in pomnilnih enot, doživela neuspeh svojih predhodnikov.

V pričujočem delu predstavljamo pristop adiabnega preklapljanja, ki uvaža sinhronizacijo prenosa podatkov med celicami [26, 27], kot rešitev, ki bi poenostavila zgradbo oz. geometrijo strukture, ki opravlja trojiški logični operaciji konjunkcije in disjunkcije. Ker adiabtni pristop poenostavlja tudi gradnjo pomnilnih struktur [28], predpostavljamo, da bo njegova uporaba pomenila korak naprej v smeri izgradnje trojiških procesnih platform na osnovi QCA.

1.2 Metodologija

K reševanju problema smo pristopili tako, da smo preučili literaturo, ki se nanaša na kvantne celične avtomate in njihovo predstavitev s pomočjo posplošenega Hubbardovega modela [7]. Temu je sledila preučitev literature, ki se nanaša na pristop adiabatske kontrole QCA struktur in njene uvedbe v model [27]. S pridobljenim znanjem smo model nadgradili, ter tako trojiško QCA celico in strukture, ki so bile doslej modelirane le na osnovi polklasičnega modela, predstavili na njegovi osnovi. Sledil je razvoj simulatorja, eksperimentalno delo in analiza rezultatov. Pridobljeno znanje in empirične rezultate smo nato uporabili za izboljšavo osnovnih enot trojiških procesnih platform.

1.3 Pregled dela

Pričujoče delo predstavlja, kako lahko z uporabo adiabatskega pristopa zasnujemo trojiško procesiranje na osnovi kvantnih celičnih avtomatov. V drugem poglavju zato predstavimo kvantni celični avtomat, dvojiško QCA celico in dvojiške QCA strukture. V tretjem poglavju nadaljujemo s kontrolo prenosa podatkov med celicami, kjer je predstavljen adiabatski način preklopa. Četrto poglavje predstavi Diracovo notacijo, eno najbolj uporabljenih notacij v kvantni fiziki, brez katere razumevanje modela ni mogoče in nadaljuje s predstavitvijo posplošenega Hubbardovega modela. V petem poglavju se osredotočimo na trojiške strukture, problematiko njihove simulacije in delovanja, predstavimo simulacijske rezultate ter predlagamo rešitve, ki temeljijo na adiabatski kontroli preklopa. V zaključku predstavimo spisek lastnih doprinosov skupaj s smernicami nadaljnjega dela.

1.4 Notacija

V magistrski nalogi predvidevamo, da bralec pozna osnove matematične logike in linearne algebre, predvsem operacije nad vektorji in vektorskimi prostori. Zaradi boljše razumljivosti dela slednje sistematično uporablja enotno notacijo:

- a, \dots, z kompleksna števila;
- $\langle \alpha |, \dots, \langle \zeta |$ vrstični ali bra vektor;
- $|\alpha\rangle, \dots, |\zeta\rangle$ stolpčni ali ket vektor;
- $\mathcal{A}, \dots, \mathcal{Z}$ vektorski prostor;

- $\mathcal{A}, \dots, \mathcal{Z}$ baza vektorskega prostora;
- $\hat{\mathbf{a}}, \dots, \hat{\mathbf{z}}$ operator v vektorskem prostoru;
- \uparrow kvantno spinsko število $+\frac{1}{2}$;
- \downarrow kvantno spinsko število $-\frac{1}{2}$;
- $[a; b]$ urejeni par vrednosti a in b .

2 Kvantni celični avtomat

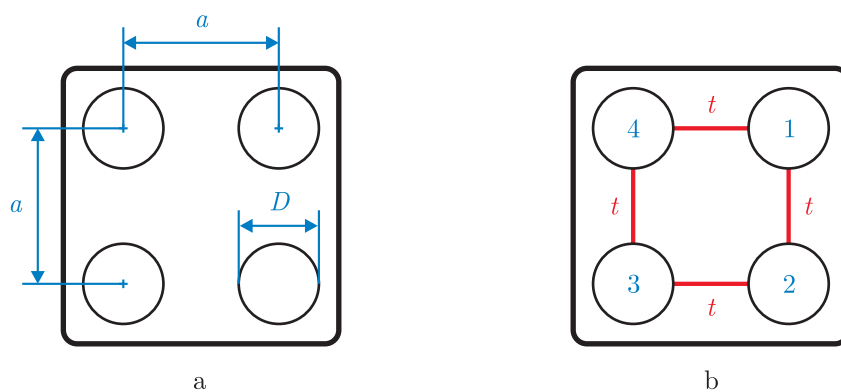
2.1 Celica s kvantnimi pikami

Napravo, ki jo je Lent v svojem znamenitem članku [7] poimenoval kvantni celični avtomat (angl. *Quantum Cellular Automaton* – QCA), bi moral dejansko poimenovati celični avtomat s kvantnimi pikami (angl. *Quantum-dot Cellular Automaton* – QdCA). S tem je avtor že na samem začetku raziskav vnesel tudi nekaj nejasnosti s samim poimenovanjem. Namreč kvantni celični avtomat je dejansko celični avtomat, ki se podreja zakonom kvantne mehanike [29] in teoriji celičnih avtomatov [30]. Po drugi strani pa je celični avtomat s kvantnimi pikami le struktura oz. naprava, pri kateri gre bolj za analogijo celičnemu avtomatu, kot pa za njegovo neposredno izvedbo. S slednjim imata skupno le to, da je naprava podana kot polje celic, ki omogočajo predstavitev končnega števila stanj, ter da je stanje neke celice odvisno od stanja njenih sosed [3, 7]. V kasnejših člankih različnih avtorjev se pojavljata obe poimenovanji, kot kratica pa le QCA. Tako smo tudi v pričujočem delu ohranili prevod prvotnega poimenovanja, torej kvantni celični avtomat oz. QCA.

Osnovni gradnik kvantnega celičnega avtomata, QCA celica, je naprava nanometrsko

velikosti zgrajena iz določenega števila kvantnih pik, ki vsebuje mobilne kvantne delce. V literaturi zato zasledimo tudi poimenovanje *celica s kvantnimi pikami* (angl. *Quantum-dot cell* – Qd cell). Kvantna pika je tridimenzionalna nanometrsko struktura oz. področje v katerem lahko lokaliziramo naboj. To je izvedeno z zajetjem (angl. *confinement*) kvantnega delca, v našem primeru elektrona, s pomočjo potencialnih pregrad (angl. *potential barriers*) [31]. Zaradi kvantno-mehanskih lastnosti zajeti elektron tunelira med sosednjimi kvantnimi pikami. Torej si QCA celico lahko predstavljamo kot planarno strukturo, v kateri se elektron lahko prosto giblje le v območju kvantnih pik med katerimi lahko tunelira, izven tega področja pa ne more zaiti. Celica deluje v režimu kjer Coulombovi vplivi prevladujejo nad tuneliranjem, kar pomeni, da zajeti elektron, v primeru prisotnosti drugih nabojev v okolici čuti Coulombove sile in zaradi tega teži k lokalizaciji v eno izmed kvantnih pik celice [7].

Celica je lahko sestavljena iz poljubnega števila pik in v njej je v splošnem lahko zajeto poljubno število elektronov.¹ Lent je raziskave, ki jih je opravljal v začetku 90-ih let prejšnjega stoletja, omejil na celico, ki bi bila sposobna predstaviti dvojiško informacijo. Ta je sestavljena iz štirih kvantnih pik nameščenih v vogale kvadrata. Gre za okrogle kvantne pike s premerom $D = 10$ nm, ki so med seboj oddaljene $a = 20$ nm (glej sliko 2.1a).² V celici sta zajeta dva elektrona [32], ki, kot že povedano, lahko tunelirata le med



Slika 2.1 Geometrija osnovne Lentove celice (a) in označbe kvantnih pik ter tunelirne poti med njimi(b).

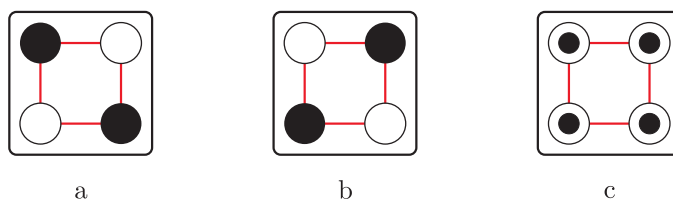
kvantnimi pikami. V smislu celičnega avtomata razporeditev elektronov v kvantnih pikah

¹Seveda obstajajo tehnološke omejitve, a za samo razumevanje te niso pomembne.

²Lent je predstavil tudi celico s petimi pikami, ki naj bi izkazovala nekoliko robustnejše delovanje. Dodatna pika se nahaja v središču kvadrata. Uporabljene so kvantne pike istega premera, le da je oddaljenost $a = 20$ nm med centralno piko in okoliškimi pikami, ki so še vedno v vogalih kvadrata.

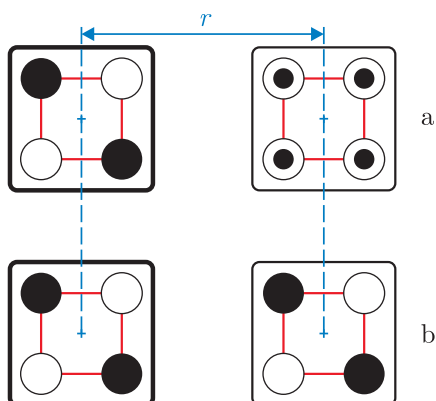
določa stanje celice. Tuneliranje elektronov izven celice ni mogoče, saj se predpostavlja, da je popolnoma zadušeno s potencialnimi pregradami [7]. Možnost tuneliranja je na sliki 2.1b predstavljena s črtami, ki povezujejo pike. Parameter t je tako imenovana *tunelirna energija*, njen kvadrat pa je premo sorazmeren z verjetnostjo tuneliranja med pikami. V primeru celice s štirimi pikami iz vsake pike obstajata dve enako verjetni smeri tuneliranja.

V izolirani QCA celici, torej celici na katero ni prisotnih zunanjih vplivov, se zajeta elektrona zaradi Coulombove odbojne sile skušata lokalizirati v pikah, ki sta medsebojno najbolj oddaljeni. V teh pikah je odbojna sila med elektronomi najmanjša. Torej se v primeru kvadratne razporeditve pik elektrona postavita diagonalno v vogale celice (slika 2.2) in v vsakem trenutku obstajata dve energijsko ekvivalentni razporeditvi. Z drugimi besedami to pomeni, da je lokalizacija elektronov enako verjetna v vseh kvantnih pikah. Pravimo, da je celica tedaj v *neutralnem* stanju, kar simbolično prikažemo kot na sliki 2.2c.



Slika 2.2 V izolirani Lentovi celici, torej celici na katero ni zunanjih vplivov, sta v vsakem trenutku možni dve energijsko ekvivalentni razporeditvi dveh elektronov (a,b). Posledica tega se kaže kot enako verjetna lokalizacija elektrona v posamezni kvantni piki (c).

Diagonalni razporeditvi elektronov nista več energijsko ekvivalentni v trenutku, ko elektroni v opisani celici čutijo Coulombove vplive zaradi nabojev iz okolice. Do teh lahko pride zaradi različnih motenj, česar si ne želimo, tipično pa jih povzroča celica, ki ni v nevtralnem stanju in je v bližini opazovane celice. Lent je za geometrijo celice predstavljeno na sliki 2.1a eksperimentalno določil razdaljo med celicami, ki omogoča pravi prenos stanja in znaša $r = 3a = 60$ nm. Predpostavimo, da ima leva celica na sliki 2.3a nespremenljivo razporeditev elektronov v kvantnih pikah 2 in 4, desna celica pa je bila do tega trenutka izolirana. Zaradi Coulombovih sil in težnji k energijsko čim nižjem stanju se razporeditev elektronov v desni celici spremeni tako, da ustreza razporeditvi v levi celici. Sosednji celici z enakima razporeditvama prikazuje slika 2.3b. Seveda je



Slika 2.3 Interakcija med celicami temelji na Coulombovih vplivih. Levo celico, ki ima nespremenljivo razporeditev elektronov približamo desni celici, ki je bila do tega trenutka izolirana (a). Zaradi Coulombovih odbojnih sil se razporeditev elektronov v desni celici spremeni tako, da ustreza razporeditvi v levi celici (b).

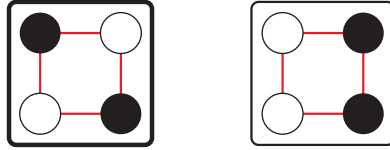
lahko začetno stanje leve celice in posledično končno stanje desne celice tudi drugačno. Enako bi lahko obravnavali tudi primer, ki bi neposredno sledil opisani interakciji. Torej, če bi levi celici na sliki 2.3b sedaj spremenili stanje, tako da bi elektrona zasedala ravno nasprotno diagonalo kot elektrona v desni celici, bi se desna celica tej spremembi prilagodila, kot je bilo opisano v uvodnem primeru. Pri tem je potrebno še enkrat poudariti, da vsa interakcija med celicami poteka le na osnovi Coulombovih sil, pod vplivom katerih se zajeti elektroni razporejajo v celici. Ker tuneliranje elektronov med celicami ni možno, ni prisotnega električnega toka, kar močno vpliva na zmanjšanje porabe energije in njene disipacije v okolje v obliki toplote. To je ena izmed pglavitnih prednosti QCA arhitekture. Tako bi v primeru nadomestitve tranzistorja, kot osnovnega gradnika, s QCA celico lahko rešili enega največjih problemov današnje VLSI CMOS tehnologije.

2.2 Simetrična nevtralizacija naboja

Opisana interakcija med celicami je možna le, če se v vsaki celici zagotovi simetrična nevtralizacija naboja (angl. *Symmetric Charge Neutralization* – SCN) [3, 33, 34]. S tem se doseže, da je s stališča okolice celoten naboj celice enak nič, torej je celica navzven elektrostatično nevtralna in ne povzroča monopolnega električnega polja. Ob upoštevanju SCN vsaka točka v opazovani celici občuti isto absolutno elektrostatično silo druge celice, ne glede na razporeditev elektronov v njej. Torej, če neka točka v opazovani celici pri eni diagonalni razporeditvi nabojev čuti privlačno silo, bo pri nasprotni diagonalni

razporeditvi občutila enako odbojno silo. To pomeni, da je odbojna sila, ki jo izkazuje neka celica enaka njeni privlačni sili.

V primeru, da celice ne bi bile elektrostatično nevtralne, interakcija prikazana na sliki 2.3 ni mogoča, saj se elektroni v desni celici, zaradi monopolnega električnega polja med celicama, razporedijo vzdolž najbolj oddaljene stranice, kot je prikazano na sliki 2.4, ne glede na razporeditev elektronov v levi celici.



Slika 2.4 Interakcija med celicama, v katerih ni zagotovljena simetrična nevtralizacija naboja, se kaže kot razporeditev elektronov vzdolž najbolj oddaljene stranice v desni celici.

Za zagotavljanje elektrostatične nevtralnosti celice je vsaki kvantni piki prirejen pozitivni naboj q_+ . Velikost naboja je odvisna od števila v celici zajetih elektronov in števila kvantnih pik ter je enaka

$$q_+ = \frac{ne_0}{m}, \quad (2.1)$$

kjer je n število zajetih elektronov, m število kvantnih pik in $e_0 = 1,6021 \times 10^{-19}$ C elementarni naboj (npr. $+e_0/2$ za dvojiško QCA celico). Kvantna pika i v kateri se nahaja elektron tako izkazuje naboj

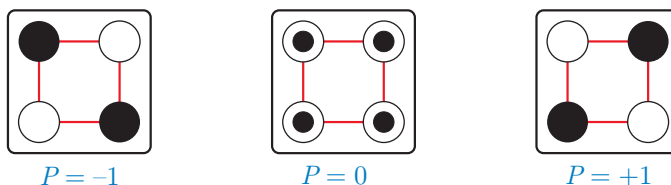
$$q_i = q_+ - e_0 = \frac{ne_0}{m} - e_0, \quad (2.2)$$

(npr. $-e_0/2$ za dvojiško QCA celico), kar pomeni, da je vsota nabojev v kvantnih pikah neke celice vedno enaka 0.

2.3 Polarizacija

Po Lentu [32] je polarizacija (angl. *polarization*) skalarna količina, ki predstavlja stopnjo s katero je naboj razporejen vzdolž ene od obeh diagonal dvojiške QCA celice, bodisi diagonale preko kvantnih pik 1 in 3, bodisi diagonale preko kvantnih pik 2 in 4. Upošteva je to dejstvo, je za celico s štirimi kvantnimi pikami (glej sliko 2.5) polarizacija definirana kot

$$P = \frac{(\rho_1 + \rho_3) - (\rho_2 + \rho_4)}{\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \rho_4}, \quad (2.3)$$

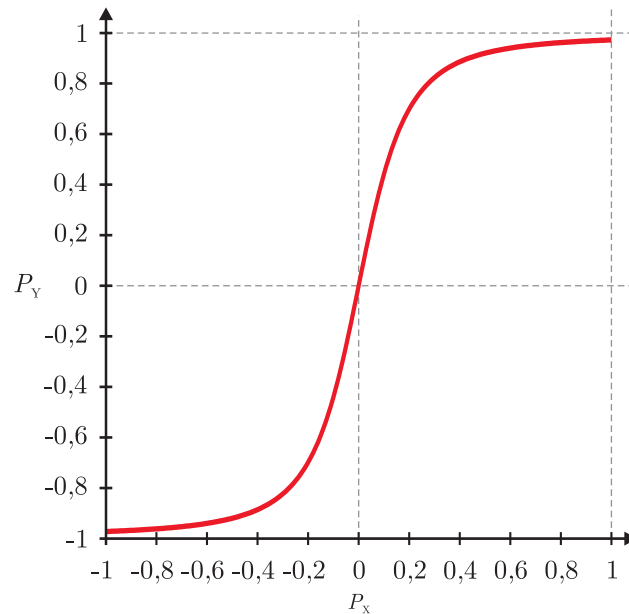


Slika 2.5 Polarizacija binarne celice.

kjer je ρ_i gostota naboja v kvantni piki i . Njen izračun je podan v poglavju 4. V danem trenutku je dovolj, če povemo, da je gostota naboja v kvantni piki, v kateri se elektron nahaja enaka ena in gostota naboja v kvantni piki, v kateri ni elektrona enaka nič. Popolna lokalizacija elektronov v kvantnih pikah 1 in 3 tako daje $P = +1$, medtem ko popolna lokalizacija elektronov v kvantnih pikah 2 in 4 daje $P = -1$. V primeru enako verjetne lokalizacije elektronov v vseh kvantnih pikah (npr. izolirana celica) ima celica polarizacijo $P = 0$. Na žalost polarizacija ni bijektivna (npr. $P = 0$ dobimo tudi, ko sta elektrona popolnoma lokalizirana v kvantnih pikah 1 in 2), zato se vedno predpostavlja idealna diagonalna razporeditev elektronov.

Polarizacija predstavlja eno izmed ključnih količin, ki omogočajo uporabo QCA kot procesne platforme. Vsaka procesna struktura mora na nek način imeti urejeno preslikavo logičnih vrednosti v svet fizikalnih vrednosti in obratno. Pri klasičnih CMOS procesnih strukturah so to omogočali različni napetostni nivoji, v primeru QCA pa polarizacija. Po dogovoru ustreza polarizaciji $P = +1$ logična vrednost 1, polarizaciji $P = -1$ pa logična vrednost 0. Ker je polarizacija realna količina na intervalu $-1 \leq P \leq +1$, lahko nanjo gledamo tudi kot na mero stanja celice oz. mero ujemanja z logično vrednostjo.

Z opazovanjem interakcije med dvema celicama v sistemu prikazanem na sliki 2.3 je Lent v [32] podal graf prikazan na sliki 2.6. Gre za graf odvisnosti polarizacije desne celice Y od leve celice X, ki mu pravimo tudi graf prevajalne funkcije interakcije dveh celic. Izračun dogajanja v opisanem sistemu je bil izveden na ta način, da so polarizacijo leve celice počasi spreminjali na intervalu od -1 do $+1$, pri čemer so ves čas predpostavljali idealno diagonalno razporeditev elektronov, ter za vsako spremembo izračunali polarizacijo desne celice. Rezultat interakcije med celicama je močno nelinearna in bistabilna funkcija, ki je potrebna za izvedbo robustnih, na šum neobčutljivih naprav. Bistabilno obnašanje je v digitalni elektroniki še posebej zaželeno. Zaradi opisane lastnosti imenujemo Lentovo celico tudi *dvojiška* QCA celica. Iz slike 2.6 lahko potegnemo



Slika 2.6 Prevajalna funkcija interakcije dveh dvojiških celic QCA.

dva pomembna zaključka [7]:

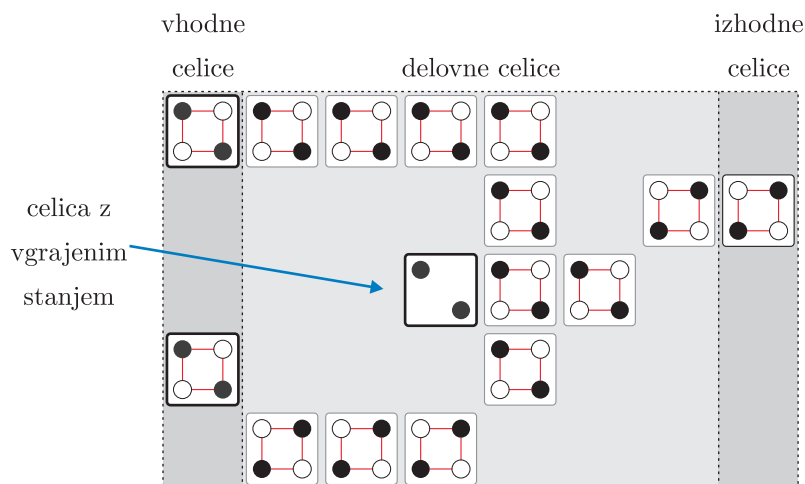
- že rahla polarizacija ene celice povzroči skoraj popolno polarizacijo sosednje celice; hitro zasičenje prevajalne funkcije je analogno ojačanju potrebnem za ohranjanje nivojev digitalne logike;
- bipolarno zasičenje omogoča predstavitev bitne informacije s pomočjo polarizacije celice; celica je skoraj vedno močno polarizirana ($P \approx \pm 1$); le v primeru popolnoma simetričnega elektrostaticnega okolja zaradi drugih celic v bližini postane polarizacija opazovane celice $P = 0$.

2.4 Model procesiranja

Kot smo že povedali, je QCA planarna struktura sestavljena iz QCA celic, ki ji pravimo tudi procesno polje. Glede na vlogo v strukturi (slika 2.7) ločimo štiri tipe celic:

- vhodne celice (angl. *input cells*) ali gonilnike (angl. *driver cells*), ki so tipično postavljeni na robovih strukture in omogočajo prenos podatka v QCA;
- delovne celice (angl. *device cells*), ki se običajno nahajajo v strukturi in z medsebojno interakcijo realizirajo neko funkcijo oz. podatkovno transformacijo;

- izhodne celice (angl. *target cells*), ki so znova tipično postavljene na robovih strukture in njihovo stanje se interpretira kot rezultat procesiranja;
- celice z vgrajenim stanjem (angl. *cells with fixed polarization*), ki se običajno nahajajo v strukturi, njihovo stanje pa je določeno med procesom izdelave in se ne spreminja.



Slika 2.7 Primer QCA in označitev vhodnih, delovnih in izhodnih celic ter celic z vgrajenim stanjem. Na vseh nadaljnjih slikah bomo vhodne celice označevali s poudarjenim robom, izhodne nepoudarjenim in delovne z robom v sivi barvi. Celice z vgrajenim stanjem bodo označene s poudarjenim robom in stanjem, ki ga izkazujejo.

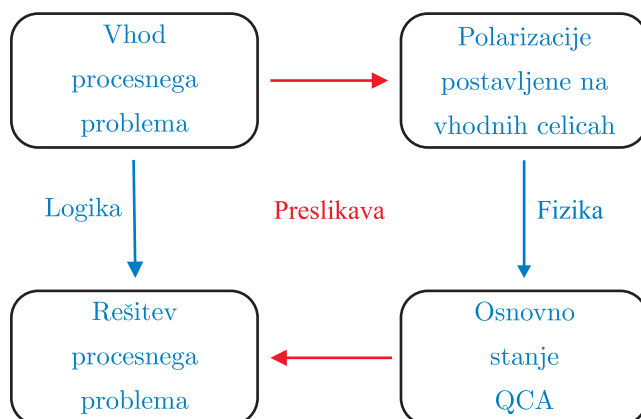
Bistvena principa, ki praktično definirata način procesiranja s QCA [7], sta *procesiranje z osnovnim stanjem* (angl. *computing with ground state*) in *robno-gnano procesiranje* (angl. *edge-driven computation*). Princip procesiranja z osnovnim stanjem določa, da je s stališča procesiranja sprejemljivo le osnovno energijsko stanje QCA. Namreč, kot vsak kvantno-mehanski sistem, lahko tudi QCA zavzema le diskretne energijske nivoje. *Osnovno stanje* kvantno-mehanskega sistema imenujemo njegov minimalni oz. najnižji energijski nivo. *Vzbujeno stanje* pa je vsako stanje sistema z energijo višjo od osnovnega stanja. Če v sistemu obstaja več kot eno osnovno stanje pravimo, da gre za *degenerirana stanja*. Tako ima dvojiška QCA celica dve degenerirani stanji, ki ustrezata polarizacijam $P = -1$ in $P = +1$. Izhodne celice vsebujejo rezultat procesiranja šele, ko te skupaj s preostalimi dosežejo svoje osnovno stanje. Druga vzbujena stanja v katera lahko ob spremembi vhodnih celic preide QCA ne smemo obravnavati kot rezultat procesiranja. Prednost procesiranja z osnovnim stanjem je neobčutljivost procesiranja na podrobnosti

disipativnega procesa, ki omogoča sprostitvev QCA v novo osnovno stanje, katero ustreza stanju vhodnih celic.

Princip robno-gnanega procesiranja določa, da se interakcija med QCA in okoljem izvaja le preko vhodnih ali izhodnih celic. Neposredne povezave v notranjost polja, t.j. povezave na delovne celice, niso dovoljene. Delovne celice so z okoljem povezane le preko vhodnih in izhodnih celic. Neposrednih povezav med celicami ni, saj prenos informacije med njimi poteka le preko interakcije na osnovi Coulombovih vplivov. Procesiranje s QCA poteka tako, da vhodne podatke prisilno vpišemo v vhodne celice. Sprememba polarizacije vhodnih celic povzroči iskanje novega osnovnega stanja preostalih celic, pri čemer interakcija delovnih celic poskrbi za ustrezno transformacijo vhodnih podatkov. Ko struktura doseže novo osnovno stanje lahko to preberemo na izhodnih celicah. Prebrana stanja izhodnih celic predstavljajo izhodne podatke oz. rešitev računskega problema za dane vhodne podatke. Interakcija s QCA samo preko vhodno/izhodnih celic rešuje problem kompleksnosti povezovanja izjemno majhnih celic s kovinskimi povezavami, ki bi lahko hitro preseгла kompleksnost samega QCA. V uvodnih raziskavah je načelo robno-gnanega procesiranja prepovedovalo tudi kakršenkoli kontrolni ali sinhronizacijski mehanizem delovnih celic. Torej naj bi QCA ob spremembi stanja vhodnih celic z disipacijo energije v okolje prešel v novo osnovno stanje. Zaradi problemov, ki jih bomo opisali v poglavju 3, so zahteve nekoliko omilili, tako da je kontrolni mehanizem sedaj dovoljen, a naj ne bi bil realiziran z neposrednimi povezavami do celic v notranjosti QCA.

Bistvo procesiranja s kvantnim celičnim avtomatom je v preslikavi problema iskanja logične rešitve v problem iskanja razporeditve celic, ki bo izvedla ustrezno transformacijo vhodnih podatkov. Glede na povedano lahko izvedbo procesiranja v QCA opišemo s tremi koraki (glej sliko 2.8):

1. vpis vhodnih podatkov s preslikavo logičnih vrednosti v stanja vhodnih celic,
2. sprostitvev strukture iz vzbujenega v osnovno stanje, ki ustreza stanju vhodnih celic,
3. branje stanj izhodnih celic in njihova preslikava v logične vrednosti.



Slika 2.8 Procesiranje s QCA poteka na ta način, da preslikamo procesne podatke v neko začetno stanje vhodnih celic. Struktura, ki zaradi tega preide v energijsko vzbujeno stanje, poišče novo osnovno stanje. Potem, ko se struktura umiri, interpretiramo stanje izhodnih celic kot rešitev začetnega procesnega problema. Torej gre za preslikavo reševanja procesnega problema v problem iskanja razporeditve celic, ki bodo s fizikalnim iskanjem osnovnega stanja izvedle ustrezno transformacijo vhodnih podatkov.

2.5 Dvojiške strukture

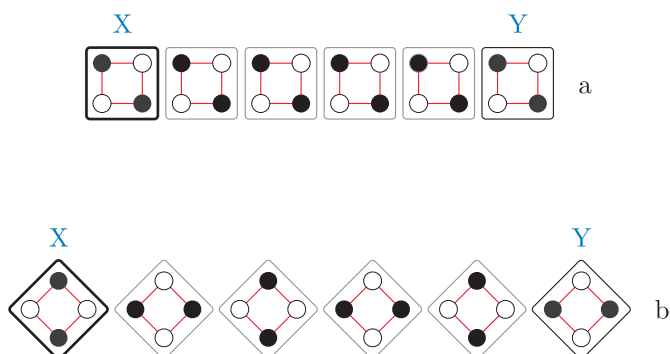
Dvojiška QCA celica je bila razvita z namenom nadomestitve tranzistorja kot osnove današnjih integriranih vezij, ter rešitve problemov pregrevanja in povezovanja. Na njeni osnovi lahko zgradimo dva tipa procesnih struktur [7]. Prvi tip predstavljajo procesna polja neregularno razporejenih celic. Gre za enostavne strukture sposobne prenašanja podatkov in izvajanja osnovnih logičnih operacij. Te lahko povežemo med seboj in na ta način gradimo kompleksnejše procesne naprave, ki predstavljajo osnovne gradnike mikroprocesorjev [10, 11]. Drugi tip predstavljajo velika procesna polja regularno razporejenih celic podobna celičnim avtomatom. Trenutno so raziskave teh struktur še v povojih, vendar jim v povezavi z izkoriščanjem paralelizma pripisujejo velik potencial [7].

V nadaljevanju bodo predstavljene strukture prvega tipa, ki tvorijo funkcijsko poln nabor v okviru Boolove algebre (negator, IN ter ALI) in linija, ki omogoča medsebojno povezovanje le-teh.

2.5.1 Linija

Osnovna struktura za prenos podatkov je QCA linija (angl. *QCA wire*). QCA linija je linija celic in temelji na interakciji sosednjih celic oz. nelinearni prevajalni funkciji predstavljeni v poglavju 2.3. Linijo lahko realiziramo na dva načina prikazana na sliki 2.9.

Pri normalni izvedbi (slika 2.9a) so poravnane stranice celic, pri diagonalni izvedbi (slika



Slika 2.9 Dve izvedbi QCA linije.

2.9b) pa so poravnane diagonale celic. Ob predpostavki idealne diagonalne razporeditve elektronov je učinkovitost linije neobčutljiva na manjše razlike v polarizacijah celic, saj se zaradi nelinearne prevajalne funkcije vsaka celica zelo hitro zasiči v ustrezno polarizacijo že ob manjši polarizaciji svoje sosede.

Privzemimo, da je prva celica X gonilnik, kateremu vsilimo željeno polarizacijo, bodisi $P = +1$, bodisi $P = -1$. V primeru normalne izvedbe linije vse celice prevzamejo polarizacijo gonilnika, saj dana polarizacija celic predstavlja osnovno energijsko stanje strukture. Tako se podatek vpisan v vhodno celico X pojavi na izhodni celici Y oz. na sliki 2.9a potuje od leve proti desni.

Posledica poravnave diagonal celic je osnovno stanje strukture, ki ustreza alternirajoči polarizaciji celic vzdolž linije od gonilnika X proti izhodu Y. Kot je razvidno iz slike 2.9b to omogoča dostop do podatka ali njegovega inverza v odvisnosti od števila delovnih celic.

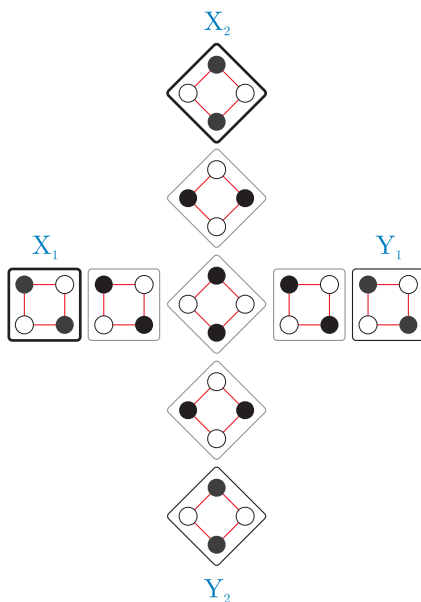
Liniji lahko opazujemo kot strukturi, ki izvajata neko preklopno funkcijo. Tako normalni izvedbi linije ustreza logična enačba

$$y = x, \quad (2.4)$$

kjer je x dvojiška logična vrednost, ki ustreza stanju gonilnika X in y dvojiška logična vrednost, ki ustreza stanju izhodne celice Y. Podobno diagonalni izvedbi linije ustreza logična enačba

$$y = \begin{cases} x, & \text{če je število delovnih celic liho} \\ \bar{x}, & \text{če je število delovnih celic sodo.} \end{cases} \quad (2.5)$$

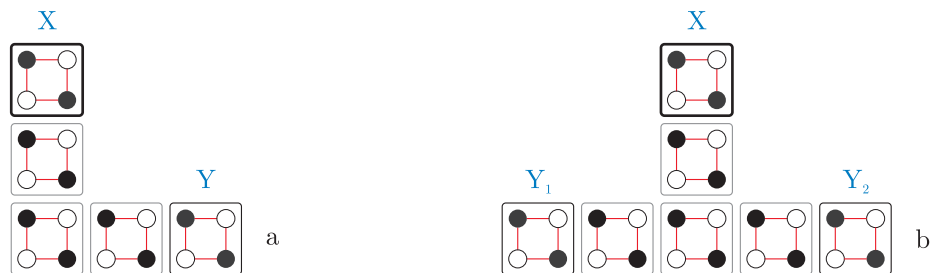
Izkaže se, da dve možnosti realizacije QCA linije omogočata tudi pravokotno križanje linij v isti ravnini (slika 2.10) pri čemer je ena v normalni izvedbi, druga pa v diagonalni. Čeprav ima normalna izvedba linije šibek člen v točki križanja, kjer sta celici dvakrat



Slika 2.10 Križanje linij QCA.

bolj oddaljeni kot druge, izračuni zagotavljajo pravilno delovanje [35]. Podatki lahko potujejo sočasno po obeh linijah, ne da bi vplivali drug na drugega. To predstavlja veliko prednost pred klasičnimi kovinskimi povezavami in omogoča večjo gostoto povezav na isti površini [35].

Poleg opisanih ravnih sta možni tudi kotna in razvejitvena linija (angl. *fan-out*) prikazani na sliki 2.11. Logična enačba kotne linije je enaka logični enačbi (2.4), logična



Slika 2.11 Kotna linija (a) in razvejitvena linija (b).

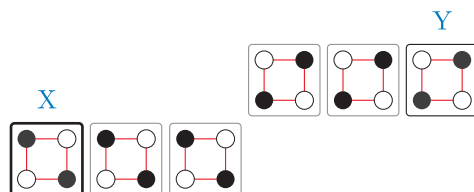
enačba razvejitvene linije pa se izraža kot

$$y_1 = y_2 = x, \quad (2.6)$$

kjer je x dvojiška logična vrednost, ki ustreza stanju gonilnika X ter y_1, y_2 dvojiški logični vrednosti, ki ustrezata stanjema izhodnih celic Y_1 in Y_2 .

2.5.2 Operacija negacije

Negator je zelo enostavna struktura, ki izhaja neposredno iz kombinacije dveh normalnih linij in lastnosti diagonalne izvedbe linije. Če poravnamo dve normalni izvedbi linije tako, da sta diagonali stičnih celic poravnani, povzročimo alterniranje polarizacije med stičnimi celicami, kar ustreza negaciji. Opisan način predstavlja osnovno izvedbo negatorja, ki je prikazana na sliki 2.12. Dani strukturi tako ustreza logična enačba



Slika 2.12 Osnovna izvedba negatorja.

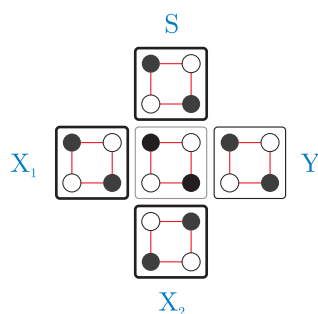
$$y = \bar{x}, \quad (2.7)$$

kjer je x dvojiška logična vrednost, ki ustreza polarizaciji gonilnika X in y dvojiška logična vrednost, ki ustreza polarizaciji izhodne celice Y. Poleg te izvedbe obstajajo še robustnejše, ki pa so namenjene predvsem izogibanju metastabilnim stanjem predstavljenim v poglavju 3.

2.5.3 Operacija konjunkcije in disjunkcije

Osnovo IN ter ALI logičnih vrat predstavlja struktura zgrajena s križanjem treh normalnih izvedb linij prikazana na sliki 2.13. Struktura ima tri vhodne celice, označene S, X_1 in X_2 , eno delovno celico ter izhodno celico Y. Struktura doseže osnovno stanje, ko se stanje delovne celice prilagodi večinskemu oz. majoritetnemu stanju treh vhodov, zato dana strukturo imenujemo tudi *majoritetna* vrata. Stanje delovne celice se nato prenese na izhodno celico. Opisana vrata opravljajo pragovno funkcijo podano z logično enačbo

$$y = sx_1 \vee x_1x_2 \vee sx_2, \quad (2.8)$$



Slika 2.13 Trivhodna majoritetna vrata.

kjer so s , x_1 in x_2 dvojiške logične vrednosti, ki ustrezajo stanju gonilnikov S , X_1 in X_2 ter y dvojiška logična vrednost, ki ustreza stanju izhodne celice Y . Če za enačbo (2.8) izpišemo pravilnostno tabelo 2.1 vidimo, da se z uporabo enega od vhodov kot

s	x_1	x_2	y
0	0	0	0
0	0	1	0
0	1	0	0
0	1	1	1
1	0	0	0
1	0	1	1
1	1	0	1
1	1	1	1

Tabela 2.1 Pravilnostna tabela majoritetnih vrat.

kontrolnega lahko skonstruiramo IN ter ALI logična vrata. Če je kontrolni vhod (npr. S) enak logični vrednosti 0 se majoritetna vrata obnašajo kot logična IN vrata. V primeru, da je ta enak logični vrednosti 1 pa majoritetna vrata opravljajo funkcijo logičnih ALI vrat. Odvisnost obnašanja majoritetnih vrat od kontrolnega vhoda predstavlja prednost, saj se lahko struktura v realnem času prilagaja rezultatom predhodnega procesiranja.

3 Kontrola prenosa podatkov

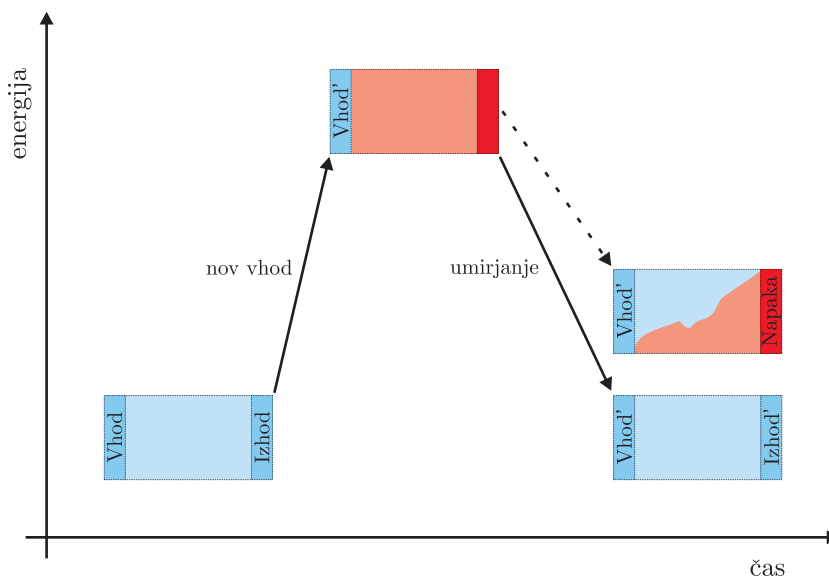
3.1 Grobo preklapljanje

Kot že povedano kvantni celični avtomat temelji na procesiranju z osnovnim stanjem. Poglavitna prednost pristopa je v tem, da podrobnosti dinamike sistema, ki jih je težko kontrolirati, niso bistvene za pravilno izvedbo procesiranja. Dinamika je pomembna le v smislu preklopa sistema iz enega osnovnega stanja v drugo osnovno stanje. To omogoča neposredno preslikavo osnovnega stanja sistema v logično rešitev problema, ki ga struktura rešuje. Pri tem je kot preklomp mišljen prehod stanja celice, ki ustreza neki logični vrednosti v stanje, ki ustreza drugi logični vrednosti in obratno.

Lent je na začetku svojih raziskav hkrati z načelom robno-gnanega procesiranja striktno sledil opisanemu načelu. Tako je procesiranje temeljilo na pristopu imenovanem *grobo preklapljanje z disipacijo v okolje* (angl. *abrupt switching with dissipative coupling to the environment*). To se izvede tako, da z nenadnim preklompom vhodnih celic postavimo QCA v neko energijsko vzbujeno stanje. Le-ta se zatem umirja v novo osnovno stanje z disipacijo energije v okolico (angl. *dissipation*). Lent je kasneje zaradi problemov, ki jih bomo opisali v nadaljevanju, načeli nekoliko omilil in predstavil pristop imenovan *adiabatno*

preklapljanje (angl. *adiabatic switching*) [27]. To je izvedeno s kontrolo tuneliranja med kvantnimi pikami v posamezni celici strukture. Na ta način se zagotavlja, da je struktura ves čas preklopa v trenutnem osnovnem stanju.

Dejali smo, da se grob preklop strukture izvede tako, da vhodne celice z nenadnim preklpom prisilno postavimo v željeno stanje. S tem, ko se stanja preostalih celic ne ujemajo več s stanji vhodnih celic, preide struktura trenutno v neko kombinacijo vzbujenih stanj. Energija vzbujanja (angl. *excitation energy*) je posledica dela, ki je bilo opravljeno ob spremembi stanja vhodne celice. Zatem se struktura z oddajanjem energije v okolico umirja v novo energijsko minimalno oz. osnovno stanje. Med procesom sproščanja se stanje vhodnih celic ne spreminja. Ko se struktura umiri, preberemo stanja izhodnih celic. Proces je shematično prikazan na sliki 3.1. Opisana naravna tendenca sistema po



Slika 3.1 Grobi preklop strukture izvedemo tako, da vhodne celice postavimo v željeno stanje. S tem preide struktura v energijsko vzbujeno stanje, iz katerega se umirja v novo energijsko stanje. Med procesom umirjanja lahko struktura preide v neko metastabilno stanje (črtkana puščica), ki v smislu procesiranja ni uporabno, oz. v osnovno stanje (polna puščica), ki je v smislu procesiranja uporabno.

zavzemanju osnovnega stanja je pri grobem preklpu tako uporabljena za izvajanje procesiranja, ki ima to lepo lastnost, da ne potrebuje nikakršne zunanje kontrole delovanja. Na žalost je proces oddajanja energije v okolje močno odvisen od trenutnih termodinamičnih lastnosti okolja in velikosti strukture [26]. Umirjanje torej ni determinističen proces, saj čas trajanja ni konstanten in lahko močno variira. Slednje pa lahko privede do

procesne neučinkovitosti sistema. Glavni problem, na katerega je Lent naletel pri gradnji kompleksnejših struktur, je pojav *metastabilnih stanj*. Namesto, da bi se struktura po postavitvi stanj vhodnih celic umirila v ustrezno osnovno stanje, obtiči v nekem lokalnem energijskem minimalnem stanju, ki ga ni moč preslikati v smiselno logično rešitev (glej sliko 3.1). Prehod iz danega stanja v dejansko osnovno stanje pa je običajno dolgotrajen, kar privede do procesnih zakasnitev.

3.2 Adiatno preklapljanje

Čeprav bi bilo grobo preklapljanje najverjetneje učinkovito v številnih implementacijah, se pojavlja skrb zaradi predhodno opisanih pomanjkljivosti. Rešitev problema je ponudil Lent s sodelavci [27] s pristopom adiatnega preklapljanja. V tem pristopu je problem pojava metastabilnih stanj odpravil s kontrolo procesa preklopa.

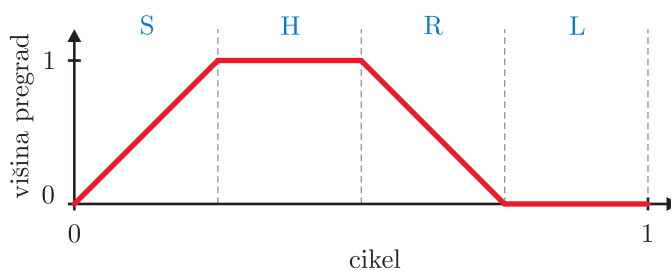
Princip adiatnega preklapljanja temelji na kvantno mehanski različici teorema adiatnosti (angl. *adiabatic theorem*) [36]. Ta pravi, če izvedemo postopen oz. dovolj počasen prekop sistema med dvema osnovnima stanjema, potem sistem ves čas preklopa ostaja v trenutnem osnovnem stanju.¹

V primeru QCA opisanemu teoremu zadostimo s kontrolo tuneliranja med kvantnimi pikami. Pri tem moramo nekoliko omiliti omejitve, ki jih določa načelo robno-gnanega procesiranja. Načelo dovoljuje interakcijo okolja s strukturo le preko vhodno/izhodnih celic ter ne dopušča nikakršne kontrole delovnih celic strukture. Za implementacijo adiatnega načina preklapljanja pa je dovoljen kontrolni mehanizem v obliki urinega signala, ki izvaja sinhronizacijo prenosa podatkov med celicami. Urin signal ni neposredno priključen na celico, temveč vpliva nanjo v obliki električnega polja, ki določa višino potencialnih pregrad med kvantnimi pikami. Na ta način bodisi dovolimo tuneliranje elektronov med kvantnimi pikami v celici in njen prekop glede na stanje preostalih celic v strukturi, bodisi ne dovolimo tuneliranja in celico na ta način zaklenemo v trenutnem stanju. Tuneliranje elektronov izven celice še vedno ni mogoče. Pri tem lahko tak signal kontrolira posamezno celico, lahko pa tudi skupino več sosednjih celic. Seveda je zaželjeno, da kontroliramo večje število celic naenkrat, saj se s tem izognemo kompleksnosti povezovanja.

¹Dejansko je teorem nekoliko bolj kompleksen. Kot že povedano, kvantno-mehanski sistem lahko zavzema le diskretne energijske nivoje, kot so osnovno stanje, prvo vzbujeno stanje, drugo vzbujeno stanje, itn. Tako teorem poleg zahteve o počasni spremembi zahteva še dovolj veliko energijsko razliko (angl. *gap*) med osnovnim stanjem in preostalimi stanji.

Urin signal, ki kontrolira proces adiabatnega preklopa, je periodični signal sestavljen iz štirih faz (glej sliko 3.2), ki si ciklično sledijo:

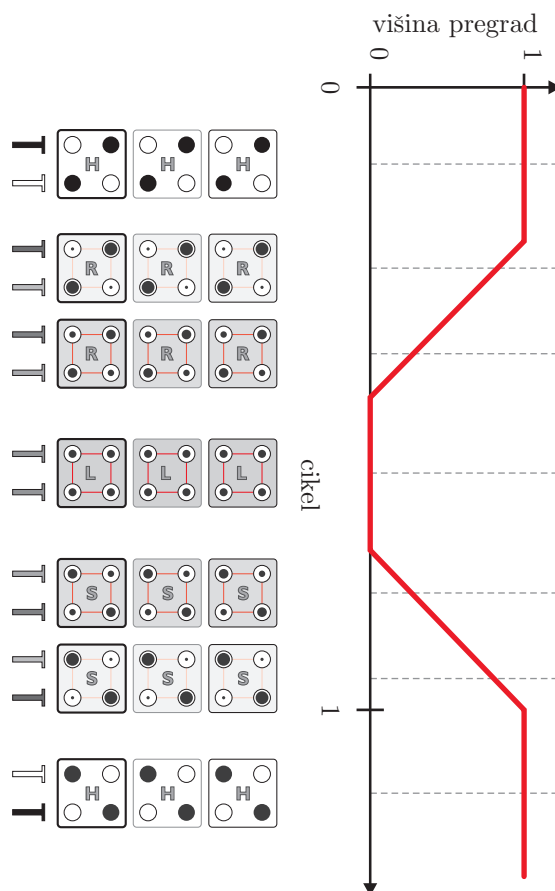
- faza preklopa (angl. *switch phase* – S) sledi fazi sproščenosti; na začetku te faze so potencialne pregrade spuščene, kar pomeni nizko stopnjo lokalizacije elektronov v kvantnih pikah in veliko verjetnost tuneliranja med njimi; posledica tega je nevtrarno stanje celice ($P = 0$); v nadaljevanju se pričnejo pregrade počasi dvigovati in možnost tuneliranja se manjša; elektroni se ustalijo v razporeditvi, ki zagotavlja najnižje energijsko stanje glede na okolico; tako v tej fazi pride do dejanske izvedbe procesiranja; na koncu so potencialne pregrade tako visoke, da tuneliranje med kvantnimi pikami ni več mogoče in elektroni so lokalizirani v kvantnih pikah;
- faza zadrževanja (angl. *hold phase* – H) sledi fazi preklopa; v tej fazi so pregrade ves čas popolnoma dvignjene, kar onemogoča tuneliranje; celice niso dovzetne na vplive ostalih celic in ne morejo spremeniti svojega stanja; ko so izhodne celice v fazi zadrževanja, lahko preberemo njihova stanja;
- faza sproščanja (angl. *release phase* – R) sledi fazi zadrževanja; potencialne pregrade se pričnejo spuščati in možnost tuneliranja se povečuje; tako celica izgublja stanje, ki ga je predhodno zadržala in se sprošča v nevtrarno stanje;
- faza sproščenosti (angl. *relaxed phase* – L) sledi fazi sproščanja in je zadnja faza v ciklu; potencialne pregrade so spuščene, kar omogoča veliko verjetnost tuneliranja elektronov med pikami, ki se kaže kot nevtrarno stanje celice ($P = 0$).



Slika 3.2 Urin signal, ki kontrolira proces adiabatnega preklopa je sestavljen iz štirih faz. To so faza preklopa (S), faza zadrževanja (H), faza sproščanja (R) in faza sproščenosti (L). Višina pregrad je normalizirana na intervalu med 0 in 1. Vrednost 0 pomeni, da so pregrade spuščene, kar pomeni veliko verjetnost tuneliranja elektronov med kvantnimi pikami, vrednost 1 pa pomeni, da so pregrade popolnoma dvignjene, kar onemogoča tuneliranje. Urine faze so enako dolge, tako vsaka zavzema $\frac{1}{4}$ urinega cikla.

Ker teorem adiabatnosti zahteva postopen oz. dovolj počasen preklop, je prehod urinega signala v fazah preklopa in sproščanja veliko počasnejši kot disipacija energije v okolje.

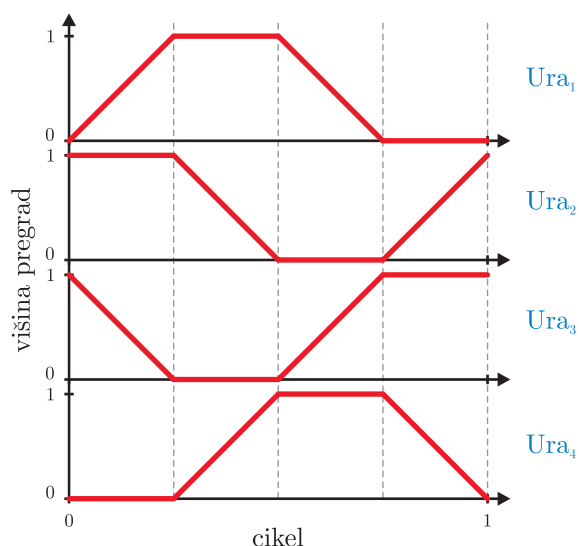
Kot primer si oglejmo proces adiabatnega preklopa QCA linije v normalni izvedbi, sestavljene iz treh celic (glej sliko 3.3). Kontrolira jo en urin signal preko potencialne elektrode, ki je nameščena pod celicami. Naj bo opazovana struktura v fazi zadrževanja, v osnovnem stanju sistema, ki je posledica prejšnjega vhoda. V fazi sproščanja se po-



Slika 3.3 Adiabatni preklop kvantnega celičnega avtomata. Strukturo smo začeli opazovati v fazi zadrževanja (H) v osnovnem stanju, ki je posledica prejšnjega vhoda. Sledijo faze sproščanja (R), sproščenosti (L) in preklopa (S). Tako kot se spreminja višina potencialnih pregrad se spreminja tudi potencial vhodnih elektrod na skrajno levi strani; temnejša barva pomeni višji negativni potencial elektrode, svetlejša barva pa višji pozitivni potencial elektrode. Barva celice označuje višino potencialnih pregrad; temnejša kot je, nižje so potencialne pregrade in večja je možnost tuneliranja, kar se kaže z intenzivnejšimi rdečimi črtami med kvantnimi pikami. Velikost pike nakazuje stopnjo lokalizacije elektrona v kvantni piki.

tencialne pregrade pričnejo zniževati, hkrati se postopoma odstranjuje prejšnji vhod na elektrodah. Nižanje potencialnih pregrad zmanjša lokalizacijo elektronov v posameznih kvantnih pikah. Odstranjevanje prejšnjega vhoda pa zmanjša zunanji vpliv, odgovoren za prejšnje stanje sistema. Celica preide v fazo sproščenosti in je skoraj popolnoma nevtralna. Temu sledi faza preklopa, ki vključuje dvigovanje potencialnih pregrad in postopne pojavitve novega vhoda na elektrodah. Dvignjene potencialne pregrade povzročijo ponovno lokalizacijo elektronov v posamezne kvantne pike in stanje strukture, ki zasede novo osnovno energijsko stanje glede na dan vhod.

Idejo adiabatskega preklapljanja je Lent s sodelavci razvil še nekoliko naprej. V primeru na sliki 3.3 so se potencialne pregrade vseh celic strukture spreminjale sočasno. Vse je vodil en urin signal. Ker je ta sestavljen iz štirih faz lahko večje strukture razdelimo na več delov oz. podsistemov, ki jih kontrolirajo štirje urini signali, med katerimi je četrtinski fazni zamik (glej sliko 3.4). Na ta način dobimo strukturo, ki izkazuje de-

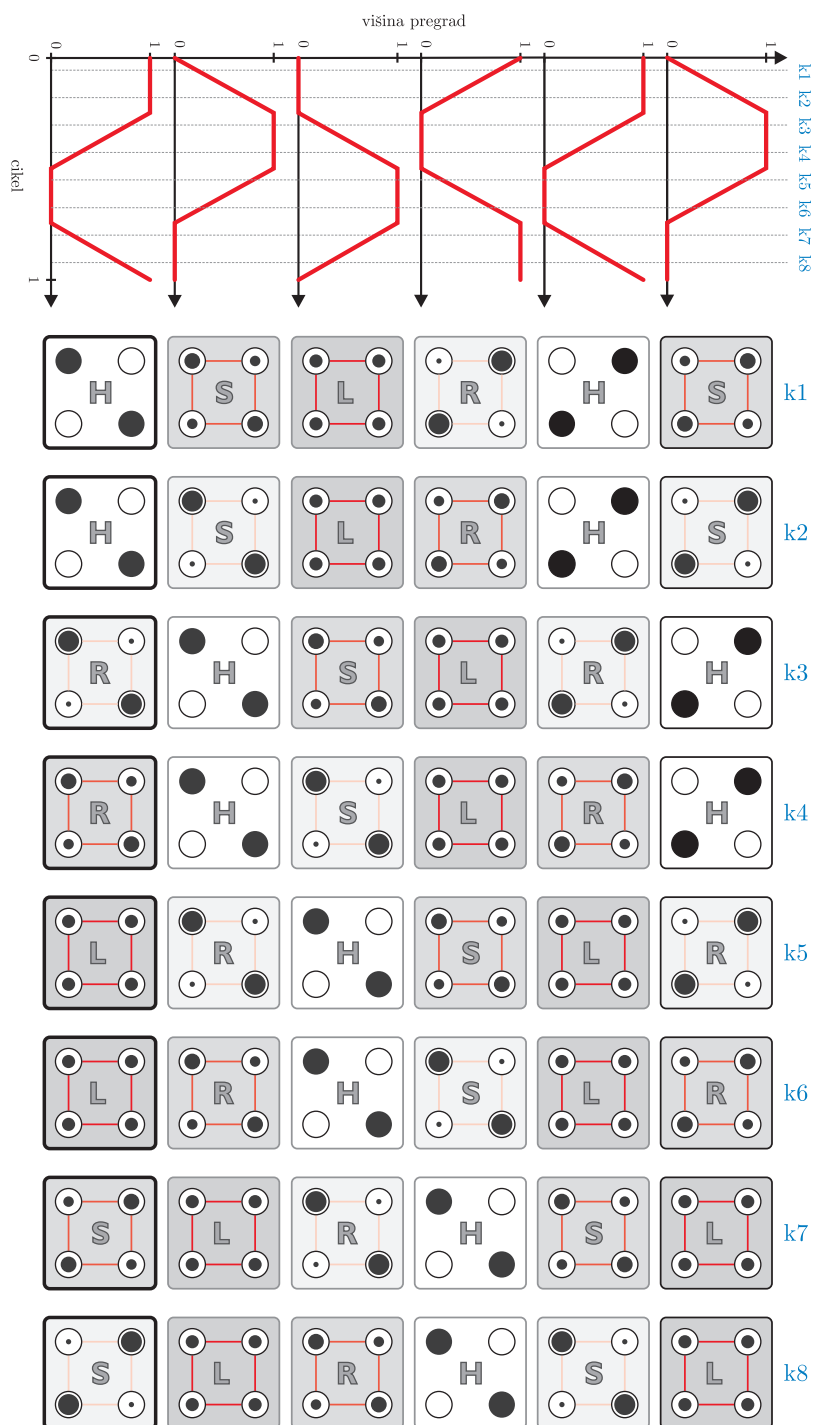


Slika 3.4 Štirje urini signali med katerimi je četrtinski fazni zamik.

lovanje podobno cevovodu. V vsakem podsistemu se neodvisno spreminja potencialne pregrade vanj vključenih celic. Vse celice v posameznem podsistemu krmili ista elektroda za kontrolo potencialnih pregrad. S tem se lahko porazdeli računski problem in izkoristi prednosti večfazne ure in cevovoda. Na ta način lahko en podsistem izvede neko procesiranje in zatem zaklene svoje stanje. Izhod tega podsistema predstavlja vhod v naslednji podsistem in tako naprej.

Delovanje arhitekture adiabatsnega cevovoda (angl. *adiabatic pipelining*) bomo predstavili na primeru QCA linije sestavljene iz šestih celic, ki jih kontrolirajo štirje fazno zamaknjeni urini signali (slika 3.5). Posamezna vrstica prikazuje trenutni posnetek oz. korak dogajanja v urinem ciklu, kar pomeni osem posnetkov prenosa podatka vzdolž linije. Črke v celicah označujejo trenutno fazo preklopa, celice pa bomo šteli od leve proti desni. Linija je sestavljena iz šestih podsistemov ali stopenj. Ker imamo le štiri urine signale imata prva in peta celica ter druga in šesta celica isti urin signal, kar je razvidno tudi iz grafov urinih signalov na vrhu slike. V prvem koraku je prva celica linije v fazi zadrževanja (H), druga celica na začetku faze preklopa (S), tretja v fazi sproščenosti (L), četrta na začetku faze sproščanja (R), peta v fazi zadrževanja (H) in šesta na začetku faze preklopa (S). V smislu procesiranja sta pomembni druga celica, katere stanje se spreminja glede na stanje prve in šesta, katere stanje se spreminja glede na stanje pete. Tretja celica, ki bi imela velik vpliv na drugo, je v fazi sproščenosti in zato nevtralna ter tako ne vpliva na obnašanje druge celice. Celici, ki sta v fazi preklopa čutita tudi vplive drugih celic, vendar je ta zanemarljivo majhen. Tako je vpliv prve celice na šesto zanemarljivo majhen glede na vpliv pete. Obratno je tudi vpliv pete celice na drugo zanemarljivo majhen glede na vpliv prve. Četrta celica bi lahko nekoliko bolj vplivala na obe celici v preklopu, vendar je v fazi sproščanja, kar pomeni da postaja vse bolj nevtralna in s tem izgublja tudi vpliv. Drugi korak je podoben prvemu, le da sta druga in šesta celica v zaključnem delu faze preklopa, četrta celica pa v zaključnem delu faze sproščanja. V tretjem koraku preidejo celice v ustrezno naslednjo fazo. Tako prva in peta celica preideta v fazo sproščanja (R), druga in šesta zadrževanja (H), tretja preklopa (S) in četrta sproščenosti (L). Na vsako celico, ki je v fazi zadrževanja (H) lahko gledamo kot na gonilnik sosednjih celic, ki so v fazi preklopa (S). Šesto celico obravnavamo kot izhodno celico sistema, kar pomeni, da v trenutku, ko je v fazi zadrževanja, lahko preberemo stanje, ki ga zadrži. Na podoben način se prenos nadaljuje v preostalih korakih. V osmem koraku tako vidimo, da je prva celica v zaključnem delu faze preklopa (S). Ker gre za vhodno celico je njeno stanje pogojeno bodisi z vplivom elektrod, bodisi z vplivom celice prehodnega podsistema, ki je v fazi zadrževanja (H).

Na podoben način lahko kontroliramo tudi negator in majoritetna vrata predstavljena v poglavju 2.5. Opisane dvojiške strukture in arhitektura adiabatsnega cevovoda so omogočili gradnjo kompleksnejših procesnih in pomnilnih struktur, katerim je sledila tudi realizacija enostavnega mikroprocesorja [13, 37–39].



Slika 3.5 Linija z arhitekturo adiabatskega cevovoda sestavljena iz šestih celic. Kontrolirajo jo štiri urini signali, katerih potek je prikazan na vrhu slike. Gledano od leve proti desni, prvo in peto celico ter drugo in četrto celico kontrolira isti urin signal. Vrstice označene k1–k8 prikazujejo trenutni posnetek oz. korak v urinem ciklu, kar pomeni osem posnetkov adiabatskega prenosa podatkov vzdolž linije. Črke v celicah označujejo trenutno fazo preklopa. V prvem koraku lahko opazimo, da taka linija omogoča hkraten prenos več kot enega bita, saj imata prva in peta celica stanji, ki ustrezata različnim logičnim vrednostma.

4 Modeliranje QCA

4.1 Polklasični model

Fizično opazovanje obnašanja struktur, ki smo jih opisali v prejšnjem poglavju, je omejeno le na manjše število raziskovalnih centrov. Večina raziskav posledično poteka analitično na osnovi različnih simulacijskih modelov. Ti se ločijo predvsem v stopnji abstrakcije struktur, ki sega od enostavne, skoraj idealizirane obravnave končnih stanj, do zapletene kvantno mehanske obravnave dinamike preklopa. V danem poglavju predstavljamo polklasični model, kot enega od predstavnikov enostavnih modelov, in posplošeni Hubbardov model, kot predstavnika modelov, ki že zajemajo kvantno mehanske lastnosti.

Polklasični model je eden najenostavnejših QCA modelov in kot tak je bil uporabljen v začetnih fazah raziskav trojiških QCA. V danem poglavju bo zaradi preprostosti opisan na primeru dvojiških QCA, razširitev in uporaba pri obravnavi trojiških QCA pa bo predstavljena v poglavju 5. Klasični del modela temelji na obravnavi elektronov kot delcev z nabojem za katere veljajo zakoni elektrike, njegova neklasična lastnost pa je dopuščanje tuneliranja teh delcev med kvantnimi pikami.

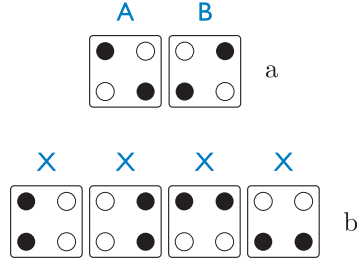
Kvantni celični avtomat se v polklasičnem modelu opazuje s stališča celotne elektro-

statične energije [31, 34], ki je podana kot energija sistema delcev z nabojem

$$E_{\text{total}} = \sum_{i \neq j} \frac{\varrho_i \varrho_j}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_{i,j}}, \quad (4.1)$$

kjer sta ϱ_i, ϱ_j naboja v pikah i in j (glej enačbo (2.2)), $r_{i,j}$ razdalja med pikama i in j , ϵ_0 permitivnost vakuumu in ϵ_r relativna permitivnost medija. Osnovno stanje sistema je tako stanje, ki zagotavlja minimalno elektrostatično energijo. Slednjo se izračuna z evaluacijo enačbe (4.1) za vse možne razporeditve elektronov v QCA.

Za izolirano dvojiško QCA celico (t.j. celico, ki ne čuti vpliva zunanje električnega polja) sta s stališča enačbe (4.1) možni dve energijsko ekvivalentni konfiguraciji. Ti ustrezata postavitvi elektronov vzdolž diagonal (slika 4.1a), kjer njuna maksimalna prostorska ločitev zagotavlja minimalno elektrostatično energijo celice. Ob prisotnosti zunanje



Slika 4.1 Možne razporeditve elektronov v dvojiški QCA celici, ki jih obravnava polkласični model. Kot vidimo, model obravnava le popolno lokalizacijo elektrona v kvantni piki. Procesno sta zanimivi razporeditvi A, ki ustreza logični 0, in B, ki ustreza logični 1. Preostale razporeditve, označene z X, so nezaželjene.

električnega polja (npr. zaradi bližine drugih celic) pa so možne tudi druge razporeditve elektronov. Diagonalni razporeditvi interpretiramo kot logični vrednosti 0 (A) in 1 (B); po Lentovi polarizaciji (glej poglavje 2.3) ti dve razporeditvi ustrezata vrednostim $P = -1$ in $P = +1$. Preostale razporeditve pa so interpretirane kot nezaželjena stanja ter zato označene z X [31].

Simetrična nevtralizacija naboja (glej poglavje 2.2), ki zagotavlja elektrostatično nevtralnost celice, je v polkласičnem modelu dosežena z dodelitvijo pozitivnega naboja ϱ_+ posamezni kvantni piki, kar pomeni, da je vsota nabojev v kvantnih pikah neke celice vedno enaka 0 [25, 34].

Polarizacijo celice izračunamo po enačbi (2.3), pri čemer je zahtevana gostota naboja podana z enačbo

$$\rho_i = \frac{\varrho_i - \varrho_+}{-e_0}, \quad (4.2)$$

kjer je ϱ_i naboj v piki i , ϱ_+ pozitivni naboj in e_0 elementarni naboj.

4.2 Posplošeni Hubbardov model

Posplošeni Hubbardov model je fizikalni model, ki omogoča dokaj enostavno obravnavo interakcije med delci s kvantno-mehanskega stališča. Glavni razlog prehoda iz trivialnega in realizacijsko enostavnega polklasičnega modela je v njegovi nezmožnosti modeliranja adiabatskega pristopa. Ker računalniški inženirji običajno nimamo dovolj znanja o kvantni mehaniki in uporabljeni notaciji bomo za razumevanje opisa modela najprej predstavili nekatere njune osnove. Pri tem se ne bomo spuščali v podrobnosti, saj te presegajo okvir pričujočega dela in jih lahko bralec najde v [29, 40, 41].

4.2.1 Diracova notacija

Kvantna mehanika kot fizikalna veda obravnava subatomske delce med katerimi so najbrž vsem poznani protoni, nevtroni, fotoni in elektroni. Posamezen delec je opisan s svojim stanjem. Kvantno stanje delca zajema vse informacije o poziciji, polarizaciji, spinu in gibalni količini. Opis oz. matematična abstrakcija stanja je lahko podana s pomočjo valovnih funkcij (*Schrödingerjeva notacija*), matrik (*Heisenbergova notacija*) ali vektorjev in vektorskih prostorov (*Diracova notacija*)¹. Slednjo imenujemo tudi *bra-ket* notacija. Njen natančen opis je Dirac podal v svoji znani knjigi ‘Principi kvantne mehanike’ [42], zasnoval pa jo je na teoriji in orodjih linearne algebre ter linearnih vektorskih prostorov.

Stanje nekega kvantnega delca ali sistema predstavimo s pomočjo posplošenih vektorjev, ki jih potem imenujemo vektorji stanja. Tak vektor označimo s simbolom $|\alpha\rangle$ in mu v Diracovem formalizmu pravimo *ket* vektor. Ket vektor je stolpčni vektor z določenim številom komponent:

$$|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}. \quad (4.3)$$

Kot že povedano, teorija kvantne mehanike, ki jo je podal Schrödinger, opisuje stanje nekega delca s pomočjo valovnih funkcij. Te pa lahko predstavimo s pomočjo ket vektorjev, ki so elementi nekega vektorskega prostora. Za obravnavo oz. analizo kvantnih stanj

¹Paul Adrien Maurice Dirac (8.8.1902—20.10.1984) je bil britanski teoretični fizik in eden izmed očetov teorije kvantne mehanike.

je najprimernejši *Hilbertov vektorski prostor* \mathcal{H} . Gre za *kompleksen linearen* vektorski prostor [29, 40]. Za kompleksen vektorski prostor velja, da so tako komponente vektorjev, kot tudi njihove dolžine kompleksna števila. Za linearen vektorski prostor pa velja, da je linearna kombinacija vektorjev, ki so elementi prostora tudi njegov element:

$$|\alpha_i\rangle \in \mathcal{H}, a_i \in \mathbb{C}, |\beta\rangle = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle \implies |\beta\rangle \in \mathcal{H}. \quad (4.4)$$

Vsak ket vektor $|\alpha\rangle$ ima tudi svoj *adjungiran*² (angl. *adjoint*) vektor, ki mu pravimo *bra* vektor. Dirac je za njegovo oznako uporabil simbol $\langle\alpha|$. Bra vektor $\langle\alpha|$ je vrstični vektor, katerega komponente so konjugirane kompleksne komponente ket vektorja $|\alpha\rangle$:

$$\langle\alpha| = [\alpha_0^* \ \alpha_1^* \ \dots \ \alpha_n^*].^3 \quad (4.5)$$

Če je $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$, potem je $\langle\alpha| \in \mathcal{H}^*$, kjer je \mathcal{H}^* adjungiran vektorskemu prostoru \mathcal{H} . Vsak ket vektor $|\beta\rangle \in \mathcal{H}$, ki je linearna kombinacija ket vektorjev $|\alpha_i\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\beta\rangle = a_1 |\alpha_1\rangle + a_2 |\alpha_2\rangle + \dots \quad (4.6)$$

ima svoj bra vektor $\langle\beta| \in \mathcal{H}^*$, ki je linearna kombinacija bra vektorjev $\langle\alpha_i| \in \mathcal{H}^*$, pri čemer velja

$$\langle\beta| = a_1^* \langle\alpha_1| + a_2^* \langle\alpha_2| + \dots \quad (4.7)$$

Hilbertovemu vektorskemu prostoru \mathcal{H} oz. njemu adjungiranem vektorskemu prostoru \mathcal{H}^* pripada tudi vektor $\mathbf{0}$ za katerega velja

$$\begin{aligned} \mathbf{0} \pm |\alpha\rangle &= |\alpha\rangle \pm \mathbf{0} = |\alpha\rangle & \text{ter} & \quad \mathbf{0} |\alpha\rangle = 0 \text{ in } 0 |\alpha\rangle = \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} \pm \langle\alpha| &= \langle\alpha| \pm \mathbf{0} = \langle\alpha| & \text{ter} & \quad \langle\alpha| \mathbf{0} = 0 \text{ in } 0 \langle\alpha| = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Dirac je definiral skalarni produkt poljubnega bra vektorja $\langle\alpha|$ s poljubnim ket vektorjem $|\beta\rangle$ kot

$$\langle\alpha| |\beta\rangle = [\alpha_0 \ \alpha_1 \ \dots \ \alpha_n] \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} = \sum_{i=0}^n \alpha_i \beta_i \quad (4.9)$$

in to notacijo poenostavil v $\langle\alpha|\beta\rangle$.⁴ Rezultat skalarnega produkta je neko kompleksno število in glede na enačbi (4.3) in (4.5) velja tudi $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$.

²Transponiran in kompleksno konjugiran.

³Operacija $*$ označuje konjugiranje kompleksnega števila: $(a \pm ib)^* = a \mp ib$.

⁴Združitev bra in ket vektorja nam v besedni igri da angleško besedo bra(c)ket iz katere izhaja tudi ime notacije.

Poleg skalarnega produkta je Dirac definiral tudi *diadični* ali *tenzorski produkt* poljubnega ket vektorja $|\beta\rangle$ s poljubnim bra vektorjem $\langle\alpha|$:

$$|\beta\rangle\langle\alpha| = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} [\alpha_0 \ \alpha_1 \ \dots \ \alpha_n] = \begin{bmatrix} \beta_0\alpha_0 & \beta_0\alpha_1 & \dots & \beta_0\alpha_n \\ \beta_1\alpha_0 & \beta_1\alpha_1 & \dots & \beta_1\alpha_n \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \beta_n\alpha_0 & \beta_n\alpha_1 & \dots & \beta_n\alpha_n \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

Rezultat diadičnega produkta je matrika.

Operator \hat{x} v Hilbertovem vektorskem prostoru \mathcal{H} oz. njemu adjungiranem vektorskem prostoru \mathcal{H}^* je matematični konstrukt s katerim predstavimo preslikavo

$$\hat{x} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} \text{ oz. } \hat{x} : \mathcal{H}^* \longrightarrow \mathcal{H}^*. \quad (4.11)$$

Dejansko je operator matrika, torej lahko deluje le na levi strani ket vektorja ali na desni strani bra vektorja. Operatorji Hilbertovega vektorskega prostora \mathcal{H} in njemu adjungiranega vektorskega prostora \mathcal{H}^* so linearni kar pomeni, da veljajo naslednje lastnosti:

$$\begin{aligned} \hat{x}(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) &= \hat{x}|\alpha\rangle + \hat{x}|\beta\rangle, \\ \hat{x}(a|\alpha\rangle) &= a\hat{x}|\alpha\rangle, \\ (\hat{x} + \hat{y})|\alpha\rangle &= \hat{x}|\alpha\rangle + \hat{y}|\alpha\rangle, \\ (\hat{x}\hat{y})|\alpha\rangle &= \hat{x}(\hat{y}|\alpha\rangle) = \hat{x}\hat{y}|\alpha\rangle, \\ \hat{x}\hat{y} &\neq \hat{y}\hat{x}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

kjer je $a \in \mathbb{C}$. Poleg tega velja tudi $\hat{x}\mathbf{0} = \mathbf{0}$ $\hat{x} = \mathbf{0}$. Kljub temu, da so lastnosti, ki jih podaja enačba (4.12) predstavljene le s primeri ket vektorjev veljajo tudi za bra vektorje, z edino razliko, da tedaj slednji nastopajo na levi strani operatorjev. Za poljuben operator \hat{x} in vektorje $|\psi\rangle, |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ ter $\langle\psi|, \langle\beta| \in \mathcal{H}^*$ velja:

$$\begin{aligned} \hat{x}|\psi\rangle &= |\alpha\rangle, \\ \langle\psi|\hat{x} &= \langle\beta|, \end{aligned} \quad (4.13)$$

kjer $\langle\beta|$ v splošnem ni adjungiran $|\alpha\rangle$. Ne glede na to iz enačb (4.9) in (4.13) sledi:

$$\langle\psi_1|\hat{x}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|(\hat{x}|\psi_2\rangle) = (\langle\psi_1|\hat{x})|\psi_2\rangle. \quad (4.14)$$

Kot že povedano bra vektor $\langle\beta|$ iz enačbe (4.13) v splošnem ni adjungiran ket vektorju $|\alpha\rangle$. Adjungiran bra vektor $\langle\alpha|$ bi dobili z uporabo adjungiranega operatorja \hat{x}^\dagger , torej:

$$\langle\alpha| = \langle\psi|\hat{x}^\dagger. \quad (4.15)$$

Operator, ki je adjungiran samemu sebi oz. za katerega velja $\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}^\dagger$ imenujemo *hermitski* operator. V našem modelu so vsi operatorji hermitski.

Enostaven primer operatorja je tudi matrika, ki smo jo predstavili kot diadični produkt dveh vektorjev $\hat{\mathbf{p}} = |\beta\rangle\langle\alpha|$. Imenujemo jo *projekcijski* operator. Ob upoštevanju *Diracovega aksioma asociativnosti množenja* ter enačbe (4.9) lahko rečemo, da projekcijski operator $\hat{\mathbf{p}}$ izvede projekcijo ket vektorja nad katerim deluje na ket vektor $|\beta\rangle$:

$$\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = |\beta\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = |\beta\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = |\beta\rangle c = c|\beta\rangle, \quad (4.16)$$

kjer je $c = \langle\alpha|\psi\rangle$. Podobno lahko rečemo tudi, da izvede projekcijo bra vektorja $\langle\psi|$ na bra vektor $\langle\alpha|$

$$\langle\psi|\hat{\mathbf{p}} = \langle\psi|\beta\rangle\langle\alpha| = \langle\psi|\beta\rangle\langle\alpha| = d^*\langle\alpha|, \quad (4.17)$$

kjer je $d = \langle\beta|\psi\rangle$.

V kvantni mehaniki operatorji niso le matematični konstrukti, ki nek vektor preslikajo v nek drug vektor, pač pa določajo stanje delca oz. so povezani s količinami, ki jih lahko merimo (npr. pozicija, spin, gibalna količina, itd.). Takim količinam pravimo *observable* (angl. *observables*). Izvedba neke meritve pomeni, da z operatorjem $\hat{\mathbf{x}}$ delujemo na nek vektor stanja $|\alpha\rangle$ po enačbi

$$\hat{\mathbf{x}}|\alpha\rangle = l|\alpha\rangle. \quad (4.18)$$

Vrednost l imenujemo lastna vrednost operatorja $\hat{\mathbf{x}}$ in predstavlja izmerjeno vrednost observable za delec v stanju, ki ga prestavlja vektor $|\alpha\rangle$. Vektor za katerega velja enačba (4.18) imenujemo lastni vektor operatorja, stanje delca, ki ga vektor opisuje pa lastno stanje operatorja. Za hermitske operatorje so lastne vrednosti vedno realne, lastni vektorji pa ortogonalni.

Vektorski prostor predstavimo s pomočjo neke bazne množice $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle\}$, kjer je n njegova dimenzija. Bazno množico $\mathcal{H} = \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle\}$ Hilbertovega vektorskega prostora \mathcal{H} predstavljajo *ortonormirani* vektorji. Zanje velja [40]:

- ortogonalnost $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = 0, \forall i \neq j$ in
- normiranost $\langle\phi_i|\phi_i\rangle = 1, \forall i$.

Poleg tega je bazna množica tudi kompletna, kar pomeni, da zanjo velja izraz:

$$\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \hat{\mathbf{1}}, \quad (4.19)$$

kjer je $\hat{\mathbf{I}}$ operator identitete. Njegov učinek pa je definiran kot $\hat{\mathbf{I}}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$ oz. $\langle\alpha|\hat{\mathbf{I}} = \langle\alpha|$.

Poljuben ket vektor $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ lahko podamo kot vsoto baznih vektorjev

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |\phi_i\rangle, \quad (4.20)$$

kjer je α_i i -ta komponenta vektorja $|\alpha\rangle$. Podobno velja tudi za bra vektor $\langle\alpha|$ v okviru vektorskega prostora \mathcal{H}^* .

Operatorje, ki pripadajo n -dimenzionalnem Hilbertovem vektorskem prostoru lahko zapišemo kot matrike velikosti $n \times n$. Elemente matrike, ki ustreza operatorju $\hat{\mathbf{x}}$, podamo s pomočjo baznih vektorjev kot

$$\hat{\mathbf{x}}_{u,v} = \langle\phi_u|\hat{\mathbf{x}}|\phi_v\rangle, \quad (4.21)$$

kjer sta $u, v = 1 \dots n$. Dejanske vrednosti elementov matrike so seveda odvisne od željenega obnašanja operatorja $\hat{\mathbf{x}}$ nad stanjem, ki ga nek bazni vektor opisuje. Na primer, člen $\hat{\mathbf{x}}_{u,v}$ je tako odvisen od željenega obnašanja operatorja nad stanjem, ki ga opisuje bazni ket vektor $|\phi_v\rangle$. Konkreten primer izračuna elementov matrike je predstavljen v poglavju 4.2.2.

Naj bo $\hat{\mathbf{x}}$ hermitski operator v Hilbertovem vektorskem prostoru z n lastnimi vrednostmi l_i , katerega lastna stanja $|\phi_i\rangle$ ustrezajo enačbi $\hat{\mathbf{x}}|\phi_i\rangle = l_i|\phi_i\rangle$. Če so lastne vrednosti različne, je množica lastnih stanj $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle\}$ ortonormirana baza. Dana množica lastnih vektorjev oz. lastnih stanj operatorja $\hat{\mathbf{x}}$ določa že zgoraj omenjeni Hilbertov vektorski prostor in predstavlja njegovo bazno množico, ki ji pravimo tudi *ket baza*.

4.2.2 Izolirana celica

Posplošeni Hubbardov model je razmeroma enostaven formalizem, ki zanemarja detajlno električno strukturo kvantne pike ter opisuje kvantno piko in njeno interakcijo z drugimi pikami s pomočjo manjšega števila fenomenoloških parametrov, kot so potencialna energija posamezne pike (angl. *on-site energy*), tunelirna energija (angl. *tunneling energy*) in Couloumbov potencial med pikami (angl. *Coulomb coupling strength*) [31]. Tak model je primeren za kvalitativno opazovanje dogajanja v sistemu več kvantnih pik, ne pa tudi natančno fizikalno obravnavo le-tega. Primer sistema več kvantnih pik je tudi dvojiška QCA celica in njena geometrija bo zaradi preprostosti uporabljena tudi za opis modela,

njegova razširitev pa bo predstavljena v poglavju 5. V opisu uporabljene vrednosti parametrov so odvisne od uporabljenega materiala (v našem primeru GaAs), in se ujemajo z vrednostmi, ki jih je v [7] podal Lent.

Osnovo posplošenega Hubbardovega modela predstavlja Hamiltonova enačba Hubbardovega tipa [7, 32]. Ta predstavlja celotno notranjo energijo QCA celice in je sestavljena iz štirih členov po izrazu

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{E}}_{\text{onsite}} + \hat{\mathbf{E}}_{\text{tunnel}} + \hat{\mathbf{E}}_{\text{antispin}} + \hat{\mathbf{E}}_{\text{interdot}}. \quad (4.22)$$

Njen prvi člen

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{onsite}} = \sum_{i,\sigma} E_0 \hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} \quad (4.23)$$

je seštevek energij posameznih izoliranih kvantnih pik. Potencialna energija posamezne kvantne pike (angl. *on-site energy*) E_0 je cena zajetja enega elektrona v kvantni piki i . Ker so te med seboj enakovredne (gre za okrogle pike z enakim radijem) in je vrednost E_0 odvisna od samih tehnoloških postopkov izdelave, lahko privzamemo, da je za vse kvantne pike enaka, ter po vrednosti znaša 1 meV.⁵ Operator štetja $\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma}$ pove koliko elektronov s spinom⁶ σ se nahaja v kvantni piki i . Definiran je kot

$$\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} = \hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}, \quad (4.24)$$

kjer člen $\hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}$, ki mu pravimo *anihilacijski* operator (angl. *annihilation operator*), uniči elektron s spinom σ v piki i , člen $\hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger$, ki mu pravimo *kreacijski* operator (angl. *creation operator*), pa v piki i kreira elektron s spinom σ .

Drugi člen

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{tunnel}} = \sum_{i>j,\sigma} t_{i,j} (\hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma} + \hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}) \quad (4.25)$$

opisuje tuneliranje med pikama i in j . Gre za seštevek tunelirnih energij $t_{i,j}$, ki predstavljajo vpliv potencialnih pregrad med pikama i in j . Tunelirna energija med pikama, med katerima tuneliranje ni dovoljeno je enaka 0. Vrednost tunelirne energije med pikami, med katerimi je tuneliranje dovoljeno, znaša $-0,1$ meV. Kreacijski in anihilacijski operator v enačbah (4.24) in (4.25) vedno nastopata skupaj, zato bomo njun produkt predstavili kot operator

$$\hat{\mathbf{t}}_{ij,\sigma} = \hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma}, \quad (4.26)$$

⁵Osebna korespondenca s prof. Craigom S. Lentom.

⁶Posamezen elektron ima lahko bodisi spinsko kvantno število $+\frac{1}{2}$ (angl. *spin-up*), označeno kot \uparrow , bodisi spinsko kvantno število $-\frac{1}{2}$ (angl. *spin-down*), označeno kot \downarrow .

ki mu bomo rekli operator *prehajanja*. Enačba (4.24) se s tem poenostavi v $\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} = \hat{\mathbf{t}}_{ii,\sigma}$, enačba (4.25) pa v $\sum_{i>j,\sigma} t_{i,j}(\hat{\mathbf{t}}_{ij,\sigma} + \hat{\mathbf{t}}_{ji,\sigma})$.

Tretji člen

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{antispin}} = \sum_i E_Q \hat{\mathbf{n}}_{i,\uparrow} \hat{\mathbf{n}}_{i,\downarrow} \quad (4.27)$$

je seštevek energij potrebnih za zajetje dveh elektronov z različnima spinoma v posamezni kvantni piki i .⁷ Energija potrebna za zajetje dveh elektronov različnega spina v isti kvantni piki znaša

$$E_Q = \frac{V_Q}{D/3}, \quad (4.28)$$

kjer je D premer kvantne pike in V_Q Coulombov potencial med pikami. Izračuna se po enačbi

$$V_Q = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}, \quad (4.29)$$

kjer je $e_0 = 1,6021 \times 10^{-19}$ C elementarni naboj, $\epsilon_0 = 8,8542 \times 10^{-12}$ permitivnost vakuumu in $\epsilon_r = 10$ relativna permitivnost (dielektrična konstanta) materiala. Ob upoštevanju danih parametrov je vrednost $V_Q = 143,8$ meV.

Zadnji člen

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{interdot}} = \sum_{i>j,\sigma,\sigma'} V_Q \frac{\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} \hat{\mathbf{n}}_{j,\sigma'}}{r_{i,j}} \quad (4.30)$$

opisuje Coulombovo interakcijo med elektroni v pikah i in j . V imenovalcu je podana razdalja med kvantnima pikama i in j .

V razširjeni obliki je enačba (4.22) potemtakem podana kot

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 &= \sum_{i,\sigma} E_0 \hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} \\ &+ \sum_{i>j,\sigma} t_{i,j} (\hat{\mathbf{t}}_{ij,\sigma} + \hat{\mathbf{t}}_{ji,\sigma}) \\ &+ \sum_i E_Q \hat{\mathbf{n}}_{i,\uparrow} \hat{\mathbf{n}}_{i,\downarrow} \\ &+ \sum_{i>j,\sigma,\sigma'} V_Q \frac{\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} \hat{\mathbf{n}}_{j,\sigma'}}{r_{i,j}}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Kot je bilo že povedano, izolirana celica ni nič drugega kot celica nad katero ni prisotnih zunanjih vplivov, zato je dogajanje, ki ga opisuje enačba (4.31), odvisno le od interakcije med elektroni, ki so ujeti v celici.

⁷Če bi model obravnaval celico z dvema elektronoma enakih spinov, bi bil dani člen nepotreben. Lent je s poizkusi pokazal, da QCA celica z elektroni različnih spinov, predvsem v smislu neobčutljivosti na šum, izkazuje nekoliko robustnejše delovanje, kot QCA celica z elektroni enakih spinov.

S fizikalno-matematičnega stališča enačba (4.31) opisuje operator v Hilbertovem vektorskem prostoru \mathcal{H} , s katerim izvajamo meritve celotne notranje energije QCA celice. Kot že povedano, vektorski prostor določa ortonormirana ket baza \mathcal{H} . V splošnem ket bazo \mathcal{H} sestavlja m^n ket vektorjev, kjer je m število kvantnih pik in n število elektronov obravnavane celice. Vektorji imajo m^n komponent, pri čemer je pri i -tem vektorju 1 le i -ta komponenta, vse ostale pa 0. Z njimi opišemo vse možne razporeditve n elektronov preko m kvantnih pik. S stališča definicije operatorjev je pomembno katero stanje sistema posamezen bazni vektor opisuje. Na primer ket bazo dvojiške QCA celice sestavljajo ket vektorji:

$$\begin{aligned} |\phi_1\rangle &\equiv \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \\ |\phi_2\rangle &\equiv \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \\ &\vdots \\ |\phi_{16}\rangle &\equiv \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

V notaciji stanja celice indeksi stolpcev sovpadajo z indeksi kvantnih pik, tako da od leve proti desni prvi stolpec ustreza kvantni piki 1, drugi stolpec kvantni piki 2 in tako naprej (glej sliko 2.1). Vrstice v tej notaciji pa obravnavajo posamezen delec/elektron tako, da gornja vrstica opisuje elektron s spinom \uparrow , spodnja vrstica pa elektron s spinom \downarrow . Če kot primer vzamemo bazni vektor $|\phi_2\rangle$, ta opisuje osnovno stanje celice v trenutku, ko je elektron s spinom \uparrow v kvantni piki 4, elektron s spinom \downarrow pa v kvantni piki 3.

Na osnovi ket baze \mathcal{H} se izračunajo elementi *Hamiltonove matrike* velikosti $m^n \times m^n$ in sicer z numerično evaluacijo formule:

$$\hat{\mathbf{H}}_{u,v} = \langle \phi_u | \hat{\mathbf{H}} | \phi_v \rangle, \quad (4.32)$$

kjer je m^n število baznih vektorjev in $u, v = 1 \dots m^n$. Dana enačba glede na (4.9) in (4.13) podaja delovanje Hamiltonskega operatorja $\hat{\mathbf{H}}$ na ket vektor $|\phi_v\rangle$ ter skalarni produkt med novim ket vektorjem in $\langle \phi_u |$. Ker je $\hat{\mathbf{H}}$ hermitski operator, je rezultat vedno realna vrednost.

Delovanje operatorja $\hat{\mathbf{H}}$ na ket vektor $|\phi_v\rangle$ bomo predstavili po posameznih operatorjih, ki se dejansko pojavljajo v členih enačbe (4.31). Ker je operator prehajanja,

predstavljen v enačbi (4.26), produkt anihilacijskega in kreacijskega operatorja, moramo njegovo delovanje na ket vektor $|\phi_v\rangle$ razčleniti na dva dela. Glede na enačbo (4.12) deluje na $|\phi_v\rangle$ najprej anihilacijski operator $\hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma}$, zatem pa na rezultat te operacije še kreacijski operator $\hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger$. V okviru predstavljene notacije stanja celice je delovanje anihilacijskega operatorja $\hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma}$ na nek ket vektor $|\alpha\rangle$ definirano kot

$$\hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma} |\alpha\rangle = \begin{cases} |\beta\rangle, & \text{če je } |\alpha\rangle_{j,\sigma} = 1 \\ \mathbf{0}, & \text{drugače,} \end{cases} \quad (4.33)$$

kjer je stanje, ki ga opisuje ket vektor $|\beta\rangle$, enako stanju, ki ga opisuje ket vektor $|\alpha\rangle$, le da je j -ti člen v vrstici σ , $|\beta\rangle_{j,\sigma} = 0$. Nasprotno kreacijski operator $\hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger$ deluje na nek ket vektor $|\beta\rangle$ po enačbi

$$\hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger |\beta\rangle = \begin{cases} |\gamma\rangle, & \text{če je } |\beta\rangle_{i,\sigma} = 0 \\ \mathbf{0}, & \text{drugače,} \end{cases} \quad (4.34)$$

kjer je stanje, ki ga opisuje ket vektor $|\gamma\rangle$, enako stanju, ki ga opisuje ket vektor $|\beta\rangle$, le da je člen $|\gamma\rangle_{i,\sigma} = 1$. Operator $\hat{\mathbf{t}}_{ij,\sigma}$ torej deluje na naslednji način:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{t}}_{ij,\sigma} |\phi_v\rangle &= \hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma} |\phi_v\rangle \\ &= \hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger (\hat{\mathbf{a}}_{j,\sigma} |\phi_v\rangle) \\ &= \hat{\mathbf{a}}_{i,\sigma}^\dagger |\alpha\rangle \\ &= \begin{cases} |\phi_z\rangle, & \text{če je } |\alpha\rangle_{i,\sigma} = 0 \text{ oz. } |\phi_v\rangle_{i,\sigma} = 1 \\ \mathbf{0}, & \text{drugače,} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.35)$$

kjer je $|\phi_z\rangle \in \mathcal{H}$. Z drugimi besedami operacijo operatorja $\hat{\mathbf{t}}_{ij,\sigma}$ interpretiramo kot prehod elektrona s spinom σ s kvantne pike j v kvantno piko i .

Operator štetja $\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma}$ po enačbi (4.24) deluje na nek ket vektor $|\phi_v\rangle$ po izrazu

$$\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} |\phi_v\rangle = \hat{\mathbf{t}}_{ii,\sigma} |\phi_v\rangle = \begin{cases} |\phi_v\rangle, & \text{če je } |\phi_v\rangle_{i,\sigma} = 1 \\ \mathbf{0}, & \text{če je } |\phi_v\rangle_{i,\sigma} = 0. \end{cases} \quad (4.36)$$

Na primer

$$\hat{\mathbf{n}}_{4,\uparrow} |\phi_2\rangle \equiv \hat{\mathbf{n}}_{4,\uparrow} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} \equiv |\phi_2\rangle,$$

ker je četrti člen vrstice, ki govori o delcu s spinom \uparrow enak 1. Torej $\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma}$ vrne le tiste ket vektorje, ki opisujejo stanja, pri katerih je delec s spinom σ v i -ti kvantni piki, sicer vrne

0. Produkt operatorjev štetja v tretjem (4.27) in četrtem (4.30) členu obravnavamo po enačbi (4.12).

Stacionarna stanja QCA celice dobimo z rešitvijo časovno neodvisne Schrödingerjeve enačbe [27]

$$\hat{\mathbf{H}} |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle \quad (4.37)$$

kjer je $|\psi_i\rangle$ i -to lastno stanje operatorja $\hat{\mathbf{H}}$ in E_i pripadajoča lastna vrednost oz. energija, ki ustreza i -temu stacionarnemu stanju QCA celice. Enačbo rešujemo s postopkom direktne diagonalizacije⁸ Hamiltonove matrike, ki jo pridobimo po enačbi (4.32). Med dobljenimi lastnimi vrednostmi E_i Hamiltonove matrike izberemo minimalno E_{\min} in njej pripadajoči lastni vektor $|\psi_{\min}\rangle$ dolžine m^n . Lastni vektor $|\psi_{\min}\rangle$ operatorja $\hat{\mathbf{H}}$, ki predstavlja osnovno stanje QCA celice, je v okviru ket baze \mathcal{H} z m^n baznimi vektorji $|\phi_i\rangle$ podan kot

$$|\psi_{\min}\rangle = \sum_{i=1}^{m^n} \psi_{\min i} |\phi_i\rangle, \quad (4.38)$$

kjer so $\psi_{\min i}$ elementi vektorja $|\psi_{\min}\rangle$. Na njegovi osnovi lahko potem izračunamo *gostoto naboja* v posamezni piki obravnavane QCA celice, kot pričakovano vrednost operatorja štetja $\hat{\mathbf{n}}_i$ v kvantni piki i

$$\rho_i = \langle \psi_{\min} | \hat{\mathbf{n}}_i | \psi_{\min} \rangle, \quad (4.39)$$

pri čemer je

$$\hat{\mathbf{n}}_i = \sum_{\sigma} \hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma}. \quad (4.40)$$

Ob upoštevanju (4.38) se (4.39) poenostavi v

$$\rho_i = \sum_j \psi_{\min j}^2 \langle \phi_j | \hat{\mathbf{n}}_i | \phi_j \rangle. \quad (4.41)$$

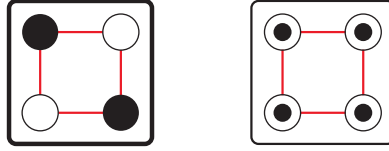
Izkaže se, da v izolirani dvojiški QCA celici obstajata dve energijsko enakovredni razporeditvi naboja. To velja vse dokler so tunelirne energije $t_{i,j}$ občutno manjše v primerjavi s Coulombovimi energijami V_Q , saj v tem primeru ostanejo elektroni močno lokalizirani. Gostota naboja ρ_i služi za izračun kvantitativne ocene stanja QCA celice, ki jo je Lent poimenoval polarizacija celice (glej poglavje 2.3).

4.2.3 Interakcija med celicami

Kvantni celični avtomat je sestavljen iz množice QCA celic, kar pomeni, da je opazovanje interakcije med celicami nujen korak naprej od opazovanja izolirane QCA celice. Namreč,

⁸Postoprek iskanja lastnih vrednosti in lastnih vektorjev matrike.

delovanje QCA temelji na vplivu, ki ga ima razporeditev elektronov v neki celici na razporeditev elektronov v preostalih celicah. Osnovni model interakcije predstavlja slika 4.2. V bistvu gre za najenostavnejši QCA, kjer leva celica igra vlogo vhodne celice ali gonilnika, desna celica pa vlogo izhodne (opazovane) celice.



Slika 4.2 Osnovni model interakcije med celicami, predstavimo kot QCA sestavljen iz dveh celic. Leva celica igra vlogo vhodne celice, katere stanje je odvisno od vhodnih elektrod in se tekom izračuna vpliva na sosednjo celico ne spreminja. Desna celica pa igra vlogo izhodne oz. opazovane celice, katere stanje izračunamo v odvisnosti od stanja leve celice.

Interakcijo desne celice z okoljem oz. sosednjo celico opišemo tako, da energiji izolirane celice $\hat{\mathbf{H}}_0$ prištejemo še energijo interakcije $\hat{\mathbf{H}}_{\text{intercell}}$. Temu členu pravimo tudi *perturbacijska Hamiltonska komponenta*. Podana je kot vsota elektrostatičnih potencialov v vsaki piki opazovane celice

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{intercell}}^c = \sum_{i,\sigma} V_i^c \hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma}, \quad (4.42)$$

kjer je V_i^c potencialna energija (elektrostatični potencial) kvantne pike i opazovane celice c zaradi interakcije z naboji v sosednjih celicah. Potentialna energija se izračuna kot vsota prispevkov interakcij med kvantno piko i v opazovani celici in kvantnimi pikami j v preostalih celicah k

$$V_i^c = \sum_{k \neq c, j} V_Q \frac{\rho_j^k - \rho_+}{r_{j,i}^{k,c}}, \quad (4.43)$$

kjer je V_Q Coulombova potencialna energija (4.29), $r_{j,i}^{k,c}$ pa razdalja med kvantno piko j v celici k in kvantno piko i v opazovani celici c ; interakcija je podana v imenovalcu in sicer kot razlika gostote naboja v kvantni piki j celice k , ρ_j^k , ter gostote fiksnega pozitivnega naboja ρ_+ . Pozitivni naboj je podobno kot pri polklasičnem modelu potreben za zagotovitev simetrične nevtralizacije naboja, ki zagotavlja elektrostatično nevtralnost celice (glej poglavje 2.2). Gostota fiksnega pozitivnega naboja je tako $\rho_+ = n/m$.

Hamiltonova enačba energije, ki upošteva interakcijo opazovane celice c z ostalimi celicami oz. okolico je torej podana kot

$$\hat{\mathbf{H}}^c = \hat{\mathbf{H}}_0 + \hat{\mathbf{H}}_{\text{intercell}}^c. \quad (4.44)$$

Če združimo oba prispevka v eno enačbo dobimo

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}^c = & \sum_{i,\sigma} (E_0 + V_i^c) \hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} + \sum_{i>j,\sigma} t_{i,j} (\hat{\mathbf{t}}_{ij,\sigma} + \hat{\mathbf{t}}_{ji,\sigma}) \\ & + \sum_i E_Q \hat{\mathbf{n}}_{i,\uparrow} \hat{\mathbf{n}}_{i,\downarrow} + \sum_{i>j,\sigma,\sigma'} V_Q \frac{\hat{\mathbf{n}}_{i,\sigma} \hat{\mathbf{n}}_{j,\sigma'}}{r_{i,j}}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Če enačbo (4.45) sedaj primerjamo z enačbo (4.31) vidimo, da se je spremenil le prvi člen. Dani člen E_{onsite} je še vedno seštevek energij posameznih kvantnih pik v opazovani celici, le da je energija posamezne kvantne pike podana kot vsota cene zajetja enega elektrona v kvantni piki E_0 in elektrostaticnega potenciala V_i^c . Ostali členi ostanejo enaki kot v enačbi (4.31) in se nanašajo na opazovano celico c .

Osnovno stanje celice izračunamo na enak način, kot v primeru izolirane QCA celice, torej kot rešitev časovno neodvisne Schrödingerjeve enačbe (4.37), s to razliko, da Hamiltonova enačba sedaj v prvem členu upošteva še vpliv sosednjih celic (4.45).

4.2.4 Medcelična Hartreejeva aproksimacija

Model predstavljen v poglavjih 4.2.2 in 4.2.3 je opazoval le eno samo celico (predstavljeno kot sistem n elektronov in m kvantnih pik), bodisi izolirano, bodisi pod vplivom okolice. V tem primeru model natančno obravnava interakcijo med elektroni in njihovo tuneliranje. Izračunana lastna stanja sistema (4.37) so dejansko lastna stanja opazovane QCA celice. Dani izračun je možen, ker lahko eksplicitno z množico baznih vektorjev opišemo vse možne razporeditve elektronov v kvantnih pikah opazovane QCA celice ter izvedemo diagonalizacijo Hamiltonove matrike v okviru baze.

Če bi hoteli na enak način pristopiti k modeliranju strukture oz. QCA sestavljene iz večjega števila celic, bi kmalu naleteli na velike težave. Namreč, če je struktura sestavljena iz k QCA celic z m kvantnimi pikami in n elektroni, baza potrebna za opis vseh razporeditev elektronov ni več velikosti m^n temveč $(m^n)^k$. S tem, ko narašča število elektronov in število pik, narašča tudi število možnih razporeditev le-teh ter s tem tudi velikost ket baze. Problem modeliranja večjih struktur predstavlja ravno eksponentno naraščanje velikosti ket baze in s tem velikosti Hamiltonove matrike v odvisnosti od števila celic. Z večanjem števila celic postane diagonalizacija matrike tako časovno zelo zahteven postopek. Posledično se moramo zateči k aproksimativnim postopkom izračuna osnovnega stanja strukture sestavljene iz večjega števila QCA celic.

Lent je v [33] predstavil pristop, ki temelji na metodi imenovani *Hartreejeva apro-*

ksimacija. Osnovno idejo je priredil potrebam simulacije interakcije QCA celic in jo poimenoval *medcelična Hartreejeva aproksimacija* (angl. *InterCellular Hartree Approximation* – ICHA). Gre za iterativni postopek, ki ne obravnava QCA kot sistema kvantnih pik in elektronov, temveč natančno obravnava vsako posamezno QCA celico v odvisnosti od preostalih celic. Pri tem se v vsaki iteraciji obravnava vse celice. Postopek se izvaja do željene konvergenčne natančnosti. Če pogledamo enačbe (4.43) in (4.45), celice v strukturi vplivajo druga na drugo tako, da vplivajo le na potencialno energijo posamezne kvantne pike. V posamezni celici je ta odvisna od gostot nabojev v kvantnih pikah sosednjih celic.⁹ V trenutni iteraciji se osnovno stanje posamezne celice torej izračuna glede na razporeditev gostote naboja v vseh ostalih celicah, ki je bila izračunana v predhodni iteraciji.

Postopek izračuna osnovnega stanja QCA po ICHA pričnemo tako, da določimo poljubne gostote naboja v vseh kvantnih pikah QCA in določimo vhodne celice, torej celice, ki ne spreminjajo svoje konfiguracije. Začetni postavitvi sistema sledi izvajanje iteracijske zanke, v kateri se vzporedno obravnava vse celice. Po enačbi (4.43) za vsako celico c izračunamo V_i^c , to je potencial i -te pike v celici, ki je posledica nabojev v kvantnih pikah preostalih celic. Čeprav vpliv bližnjih sosed prevladuje, upoštevamo vplive vseh celic v strukturi. Izračunan potencial vpliva na perturbacijski del Hamiltonove enačbe $\hat{\mathbf{H}}_{\text{intercell}}^c$ (glej enačbo (4.42)).

Osnovno stanje celice c izračunamo kot rešitev časovno neodvisne Schrödingerjeve enačbe

$$\hat{\mathbf{H}}^c |\psi_i^c\rangle = E_i^c |\psi_i^c\rangle, \quad (4.46)$$

kjer je $|\psi_i^c\rangle$ i -to lastno stanje operatorja $\hat{\mathbf{H}}^c$ za celico c in E_i^c pripadajoča lastna vrednost oz. energija celice. Dejanski postopek izračuna je enak kot v primeru izolirane celice (glej enačbo (4.37)).

Izračunan lastni vektor $|\psi_{\min}^c\rangle$, ki mu ustreza minimalna lastna energija E_{\min}^c , predstavlja osnovno stanje celice c ter ga uporabimo za izračun nove gostote naboja v kvantni piki i obravnavane celice

$$\rho_i^c = \langle \psi_{\min}^c | \hat{\mathbf{n}}_i | \psi_{\min}^c \rangle, \quad (4.47)$$

kjer je $\hat{\mathbf{n}}_i$ operator štetja podan v enačbi (4.40). Izračunane nove gostote nato uporabimo za izračun energije strukture E_{total} . Ta je podana kot vsota minimalnih energij posa-

⁹Naboj v sosednjih celicah imenujemo tudi *generator Hartreejevega potenciala*.

meznih celic od katere odštejemo *Hartreejev korekcijski člen* (angl. *Hartree correction term*), ki izloči dvojno štetje Coulombovih energij interakcij med celicami:

$$E_{\text{total}} = \sum_c E_{\text{min}}^c - \sum_{c>k,i,j} V_Q \frac{\rho_i^c \rho_j^k}{r_{i,j}^{c,k}}, \quad (4.48)$$

kjer je ρ_i^c gostota naboja v i -ti kvantni piki celice c , ρ_j^k gostota naboja v j -ti kvantni piki celice k in $r_{i,j}^{c,k}$ razdalja med i -to kvantno piko celice c in j -to kvantno piko celice k . Konvergenčna natančnost ΔE , ki določa pogoj zaustavitve iteracijskega postopka, je podana kot

$$\Delta E = \left| E'_{\text{total}} - E_{\text{total}} \right|, \quad (4.49)$$

kjer je E'_{total} energija strukture izračunana v predhodni iteraciji. Iteracijo zaključimo, ko je $\Delta E < \varepsilon$.

Poudariti je treba, da je rešitev, ki nam jo da ICHA pristop, lastno stanje celotnega sistema, ki v splošnem ni nujno osnovno stanje. Lastno stanje h kateremu postopek konvergira je v splošnem odvisno od začetnega izbora razporeditve nabojev. Torej se nam lahko zgodi, da ob nesrečni začetni izbiri postopek skonvergira v nek lokalni minimum, ki seveda ni osnovno stanje celotnega sistema. Tako moramo v splošnem sistematično poizkusiti več začetnih razporeditev in izbrati tisto rešitev, ki ima najnižjo energijo. Seveda se verjetnost ujetja v lokalni minimum večja s kompleksnostjo strukture, ki jo simuliramo. Na srečo opisana omejitev v našem primeru ni predstavljala resnega problema, ker je množica osnovnih stanj majhna in se možna osnovna stanja medsebojno močno razlikujejo.

4.2.5 Vpeljava adiabatnosti

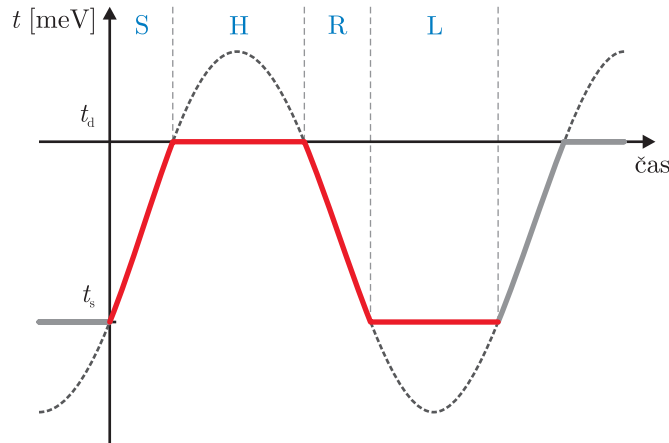
Določitev gostote naboja v posameznih kvantnih pikah temelji na iterativnem postopku ICHA, ki izvaja izračun časovno neodvisne Schrödingerjeve enačbe (4.46). Parametri, s katerimi so opisana energijska stanja QCA celic, torej E_0 , t , V_Q in E_Q , so konstantni, saj se lastnosti celic s časom ne spreminjajo. Pristop adiabatnega preklopa pa po drugi strani zahteva kontrolo nad možnostjo tuneliranja med kvantnimi pikami. Ta v opisu energijskega stanja celic ustreza parametru t .

Proces adiabatnega preklopa lahko simuliramo na dva načina, odvisno od tega, ali nas zanima njegova dinamika, ali le končni rezultat. V pričujočem delu se osredotočamo le na končni rezultat, zato bomo postopek izračuna nadgradili po vzoru simulacijskega jedra orodja QCADesigner [43].

Postopek temelji na dveh zankah. Zunanja postopoma spreminja vrednost parametra tunelirne energije t , medtem ko notranja za vsako njegovo spremembo izvaja iterativni izračun časovno neodvisne Schrödingerjeve enačbe, in sicer do neke želene konvergenčne natančnosti. Ker v vsakem koraku spremembe vrednosti parametra t (urinega signala), izvedemo proces umirjanja (simulira ga notranja zanka), sledimo teoremu adiabatsnosti, saj je hitrost spremembe urinega signala počasnejši od procesa umirjanja.

Vrednosti parametra t so realne vrednosti z intervala $t \in [t_d, t_s]$. Vrednost t_d je tipično 0 meV in ustreza trenutku, ko so potencialne pregrade popolnoma dvignjene in tuneliranje med kvantnimi pikami ni mogoče. Vrednost t_s je običajno manjša od nič¹⁰ in odvisna od geometrije celice (npr. za dvojiško celico znaša $t_s = -10$ meV). Ta ustreza spušenim pregradam, ko je verjetnost tuneliranja med kvantnimi pikami velika.

Lent je v [27] z izračuni pokazal, da bi se tekom adiabatsnega preklopa potencialne pregrade morale spreminjati v okviru vrednosti, ki bi ustrezale profilu Gaussove funkcije. Temu bi moral ustrezati tudi signal enega cikla kontrolne ure. Kasneje je Walus v [43] pokazal, da za potrebe simulacije zadošča le približek Gaussove funkcije. Običajno se uporablja kar izpeljanka sinusoidne funkcije oz. njen izsek, ki je podoben funkciji prikazani na sliki 3.2 (npr. QCADesigner uporablja funkcijo prikazano na sliki 4.3). Torej, v fazi



Slika 4.3 Izsek sinusoidne funkcije, ki se uporablja kot kontrolna ura parametra tunelirne energije t v simulacijskem orodju QCADesigner. Vrednost parametra t se spreminja na intervalu od $t_d = 0$ meV do t_s . Zadnja vrednost je odvisna od geometrije celice ter za dvojiško celico znaša -10 meV.

preklopa se vrednost parametra t spreminja od t_s do t_d , v fazi zadrževanja se vrednost

¹⁰V literaturi zasledimo tudi t_s večji od 0, kar pa ne vpliva na rezultat izračuna.

t_d ohranja, v fazi sproščanja se vrednost spreminja od t_d do t_s in v fazi sproščenosti se vrednost t_s ohranja.

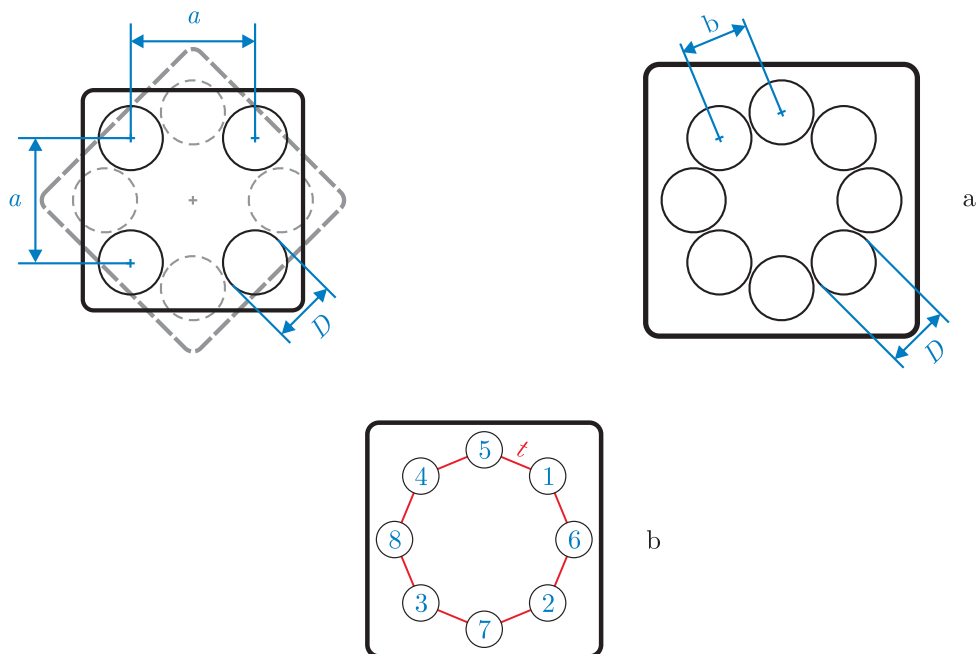
5 Trojiški QCA

5.1 Razširitev dvojiške QCA celice

Predstavljena ideja o kvantnem celičnem avtomatu kot procesni platformi se je kot veliko podobnih idej upognila pod težo trenutnih razvojnih smernic. Tako se je večina raziskovalcev omejila le na raziskave dvojiških celic in struktur, z namenom neposredne nadomestitve dosedanjih CMOS integriranih vezij. Po drugi strani pa je uporaba dvojiške logike kot osnove računalniških struktur le posledica tehnoloških omejitev s katerimi so se snovalci srečevali v preteklosti, kar pomeni, da procesne platforme prihodnosti ne smejo zanemariti možnosti implementacije in uporabe večvrednostne logike [14, 44].

Lebar Bajec s sodelavci [24] je pokazal, da je QCA celica primerna platforma za podporo trojiški logiki. Osnovno geometrijo dvojiške celice je ob predpostavki, da ne obstajajo tehnološke omejitve, razširil s štirimi dodatnimi kvantnimi pikami. Ideja temelji na lastnostih, ki jih izkazujeta poravnava stranic in poravnava diagonal dvojiških celic (glej poglavje 2.5.1). Torej, če združimo razporeditvi kvantnih pik normalno in diagonalno poravnane dvojiške celice, dobimo celico z osmimi kvantnimi pikami razporejenimi po krožnici z radijem $\frac{a\sqrt{2}}{2}$, kjer je a razdalja med dvema kvantnima pikama v dvojiški

QCA celici (glej sliko 5.1). Na ta način je Lebar Bajec ohranil pozicije kvantnih pik 1-4



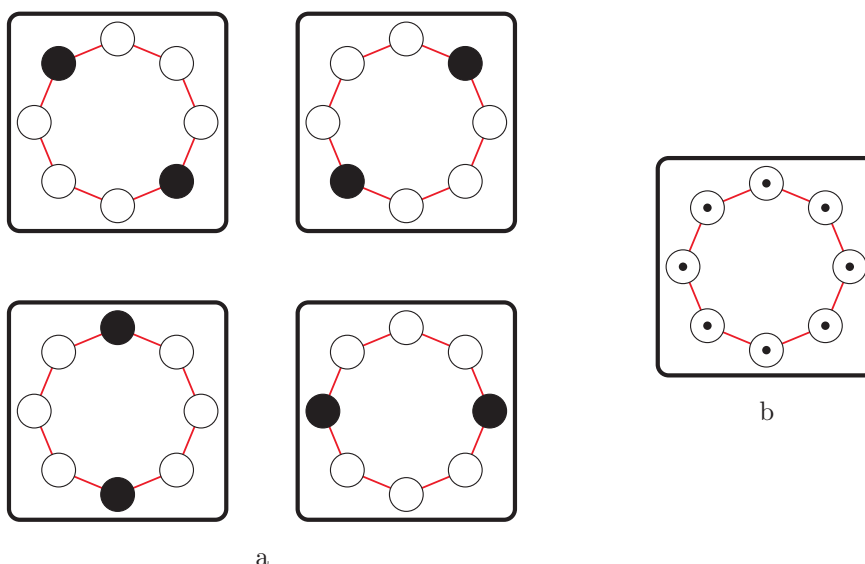
Slika 5.1 Geometrija razširjene QCA celice dobljene z združitvijo normalno in diagonalno poravnane dvojiške celice (a). Zaradi preglednosti bo celica na vseh nadaljnjih slikah prikazana kot v primeru (b).

in 5-8 na istih mestih, kot v dvojiški celici. Posledično je lahko tudi v strukturah sestavljenih iz novih celic ohranil razdaljo med središči celic $r = 3a$. Ta se ujema z razdaljo med celicami v dvojiških strukturah. Razdalja med središči sosednjih kvantnih pik pa se je zmanjšala iz 20 nm, kolikor je znašala v dvojiški celici, na $b = 10,8$ nm. Zavedamo se, da bi to najverjetneje povzročalo probleme pri realizaciji takšne celice, saj bliže kot so kvantne pike (premera $D = 10$ nm) težje je zagotoviti lokalizacijo elektrona v okviru ene same kvantne pike, a opisano dejstvo nima vpliva na simulacijske rezultate. Parameter posplošenega Hubbardovega modela, na katerega bi vplivalo, je potencialna energija E_0 . Kot že povedano, je ta odvisna od tehnoloških postopkov izdelave, njena privzeta vrednost pa 1 meV. Kvantne pike na vseh slikah, ki prikazujejo razširjene QCA celice, so tako zaradi boljše vidljivosti prikazane v pomanjšanem merilu (glej sliko 5.1b).

V razširjeni celici sta še vedno zajeta dva elektrona za katera veljajo enake omejitve tuneliranja kot v primeru dvojiške celice. Tako, elektrona lahko tunelirata le med sosednjimi kvantnimi piki, ne pa izven celice. Celici se zagotovi tudi elektrostatična nev-

tralnost s prireditvijo pozitivnega naboja $+e_0/4$ vsaki kvantni piki. Tako kvantna pika v kateri je v celoti lokaliziran elektron izkazuje naboj $-3e_0/4$. Zaradi odbojnih sil med elektroni in elektrostatične nevtralnosti celice sledi, da se v celici elektroni lokalizirajo v pike, ki se nahajajo na nasprotnih straneh glede na njeno središče. Taka razporeditev ustreza največji prostorski ločitvi elektronov.

Ob odsotnosti zunanjih vplivov obstajajo v razširjeni celici štiri energijsko ekvivalentne razporeditve elektronov (slika 5.2a), ki se kažejo kot enako verjetna lokalizacija elektronov v katerikoli kvantni piki (slika 5.2b). V primeru prisotnosti vplivov celic v soseščini pa se favorizira ena izmed štirih. V nadaljevanju bomo pokazali, da lahko

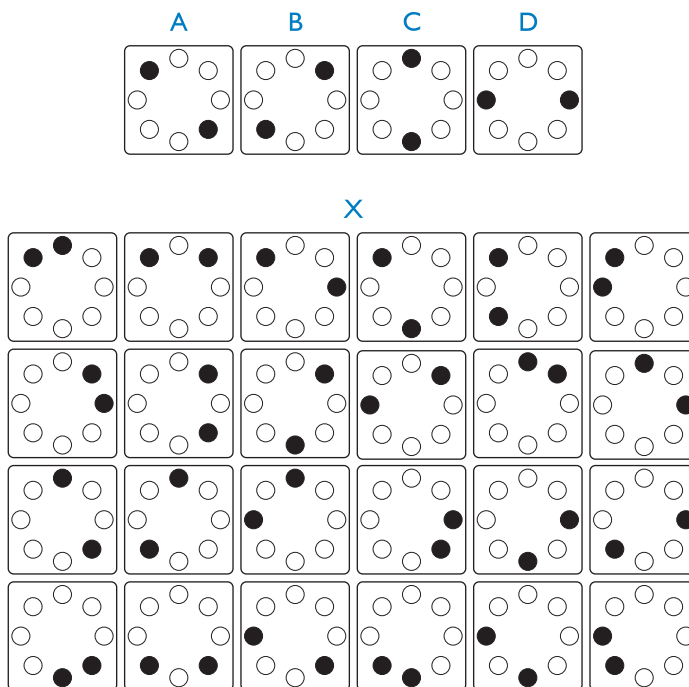


Slika 5.2 Štiri energijsko ekvivalentne razporeditve elektronov v izolirani celici z osmimi kvantnimi pikami (a), ki se kažejo kot enako verjetna lokalizacija elektronov v posamezni kvantni piki (b).

razširjena celica opisuje logične vrednosti v okviru trojiške logike, zato jo je Lebar Bajec tudi poimenoval trojiška celica s kvantnimi pikami (angl. *ternary quantum-dot cell*) [25]. Strukturo, katere osnovni gradnik je opisana celica, posledično imenujemo trojiški kvantni celični avtomat (tQCA), iz tega pa izhaja tudi poimenovanje osnovnega gradnika kot tQCA celice.

S povečanjem števila kvantnih pik, se poveča tudi število možnih stanj celice, ki jih mora simulacijski model obravnavati. V okviru polklasičnega modela je Lebar Bajec moral upoštevati namesto šestih možnih stanj dvojiške celice (glej sliko 4.1) kar 28 možnih

stanj trojiške celice (glej sliko 5.3). Dodatne prilagoditve modela, razen popravka vredno-



Slika 5.3 Možne razporeditve elektronov v trojiški QCA celici, ki jih obravnava polklasični model. Enako kot v primeru dvojiške QCA celice, model obravnava le popolno lokalizacijo elektrona v posamezni kvantni piki. Povečanje števila pik v celici močno poveča število možnih stanj. Procesno so zanimive razporeditve A, ki ustreza logični 0, B, ki ustreza logični 1, ter C in D, ki ustrezata logični $\frac{1}{2}$. Preostale razporeditve, označene z X, so nezaželjene.

sti pozitivnega naboja, ki se ga dodeli posamezni kvantni piki (t.j. $+\frac{e_0}{4}$), niso potrebne.

Povečanje števila možnih stanj tQCA celice se v splošnem Hubbardovem modelu kaže kot povečanje ket baze \mathcal{H} . Tako se baza šestnajstih ket vektorjev, ki so opisovali vsa možna stanja dvojiške celice razširi na štiriinšestdeset ket vektorjev, ki opisujejo vse možne razporeditve dveh elektronov po osmih kvantnih pikah. Ob upoštevanju notacije predstavljene v poglavju 4.2.2 bazo sestavljajo ket vektorji:

$$\begin{aligned}
 |\phi_1\rangle &\equiv \left| \begin{array}{cccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right\rangle, \\
 |\phi_2\rangle &\equiv \left| \begin{array}{cccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right\rangle, \\
 &\vdots
 \end{aligned}$$

$$|\phi_{64}\rangle \equiv \left| \begin{array}{cccccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right\rangle.$$

Če predpostavimo, da so za realizacijo trojiške QCA celice uporabljeni isti materiali in isti tehnološki postopki, kot za dvojiško QCA celico, so dodatne prilagoditve posplošenega Hubbardovega modela, ki obravnava le grobo preklapljanje, vezane le na popravek vrednosti gostote fiksnega pozitivnega naboja v posamezni kvantni piki in izbiro ustrezne vrednosti parametra tunelirne energije t (glej poglavje 5.3.1). Vrednost gostote fiksnega pozitivnega naboja znaša $\rho_+ = \frac{1}{4}$.

5.2 Problem osnovne definicije polarizacije

Kot že povedano predstavlja polarizacija eno izmed ključnih količin, ki omogočajo uporabo kvantnih celičnih avtomatov kot procesnih struktur. Ta namreč omogoča preslikavo logičnih vrednosti v stanja celic in obratno. Omenili smo že, da polarizacija podana z enačbo (2.3) ni bijektivna funkcija, ki bi kot neka skalarna vrednost enolično opisala razporeditev verjetnostne gostote naboja v kvantnih pikah celice. Ne glede na to je to mera, ki govori o stopnji, s katero je naboj razporejen vzdolž ene izmed diagonal. V primeru lokalizacije elektronov v kvantnih pikah 1 in 3 je njena vrednost $P = -1$, v primeru lokalizacije v kvantnih pikah 2 in 4 pa $P = +1$.

S tem, ko smo podvojili število pik, se je podvojilo tudi število dovoljenih razporeditev elektronov. Enostavna razširitev enačbe (2.3), ki bi ustrezno opisovala stanje tQCA celice s tem postane nemogoča. Lebar Bajec popolno lokalizacijo elektronov v kvantnih pikah 2 in 4 označuje kot stanje A, v pikah 1 in 3 kot stanje B, v pikah 5 in 7 kot stanje C ter v pikah 6 in 8 kot stanje D. Opazimo lahko, da je stanje A ekvivalentno Lentovi polarizaciji $P = -1$, ki ga še vedno interpretiramo kot logično vrednost 0, stanje B pa polarizaciji $P = +1$, ki ga interpretiramo kot logično vrednost 1. Novo predstavljeni stanji C in D sta interpretirani kot logična vrednost $\frac{1}{2}$ (glej sliko 5.3). Zaradi vzrokov, ki jih bomo predstavili v nadaljevanju, smo privzeli, da se lahko stanje D pojavlja le kot interno procesno stanje, ne pa kot stanje vhodnih ali izhodnih celic strukture.

Seveda, je naš cilj definirati dovolj splošen in fleksibilen pristop za izračun stopnje ujemanja dejanske razporeditve naboja z željenimi razporeditvami, ki bi bil uporaben tako v domeni dvojiških, trojiških, kot tudi morebitnih večvrednostnih kvantnih celičnih avtomatov. Podali smo dva načina izračuna.

5.2.1 Trojiška polarizacija

Prvi izmed načinov izračuna izhaja iz spoznanja, da je tQCA celica sestavljena iz dveh dvojiških QCA celic, kot je bilo podano na začetku poglavja 5.1. Za opis njenega stanja lahko torej uporabimo dve ločeni enačbi za polarizacijo, pri čemer ena obravnava polarizacijo diagonal, druga pa polarizacijo vertikale in horizontale. To pomeni, da je opis razporeditve elektronov v kvantnih pikah 2 in 4 oz. 1 in 3, torej stanj A in B podan kot

$$P_{AB} = \frac{(\rho_1 + \rho_3) - (\rho_2 + \rho_4)}{\sum_{i=1}^m \rho_i}, \quad (5.1)$$

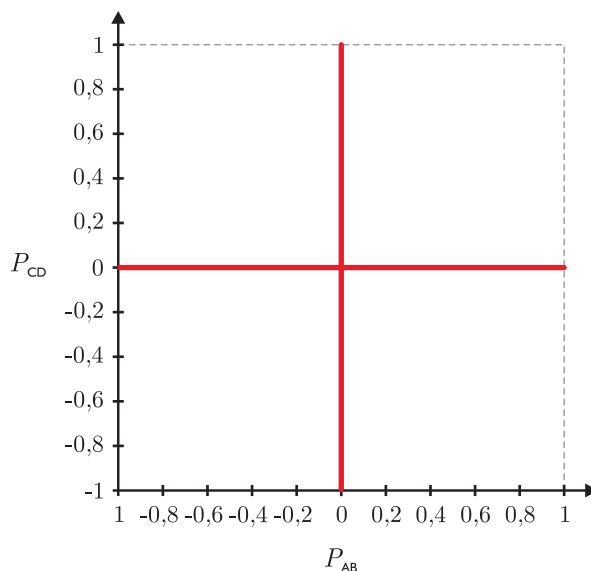
kjer je m število kvantnih pik. Numerična vrednost $P_{AB} = -1$ ustreza stanju A, medtem ko vrednost $P_{AB} = +1$ ustreza stanju B. Kot vidimo je enačba (5.1) pri $m = 4$ popolnoma enaka enačbi (2.3).

Analogno temu lahko razporeditev elektronov v kvantnih pikah 5 in 7 oz. 6 in 8, torej stanj C in D, podamo kot

$$P_{CD} = \frac{(\rho_5 + \rho_7) - (\rho_6 + \rho_8)}{\sum_{i=1}^m \rho_i}. \quad (5.2)$$

Numerična vrednost $P_{CD} = +1$ ustreza stanju C, $P_{CD} = -1$ pa stanju D.

Dobljeni vrednosti obravnavamo kot urejeni par $[P_{AB}; P_{CD}]$, ki predstavlja dejansko polarizacijo trojiške celice. Slednjega lahko grafično predstavimo v dvodimenzionalnem



Slika 5.4 Zaloga vrednosti idealizirane trojiške polarizacije.

kartezičnem koordinatnem sistemu, v katerem na os X na intervalu $[-1, 1]$ nanašamo vrednost P_{AB} , na os Y pa na enakem intervalu vrednost P_{CD} . V idealiziranem primeru, kjer je razporeditev gostote naboja vedno po diagonalah oz. vertikali ali horizontali in prehodi potekajo vedno čez nevtralno stanje je zaloga vrednosti take predstavitve prikazana na sliki 5.4. Če opisanemu prikazu odstranimo os Y, dobimo predstavitev zaloge vrednosti Lentove polarizacije. Seveda je tak idealiziran primer v realnosti nemogoč, vendar je njegova uporaba, predvsem pri določanju stanja gonilnika, dokaj običajna [33].

5.2.2 Stopnja ujemanja z željenim stanjem

Kot je razvidno trojiška polarizacija opisuje stanje celice še vedno v obliki para vrednosti. Drugi način tako skuša neposredno opisati stopnjo ujemanja dejanske razporeditve gostot naboja z željeno razporeditvijo oz. željenim stanjem. V ta namen stanje celice z m kvantnimi pikami in n elektroni opazujemo kot točko v m -dimenzionalnem Evklidskem prostoru \mathbb{R}^m , pri čemer i -ti element vektorja $\vec{\rho}$ predstavlja gostoto naboja ρ_i v kvantni piki i ter, kot že povedano, velja $\rho_i \in [0, 2]$, $\forall i$ in $\sum_i \rho_i = n$.

Stopnjo ujemanja neke razporeditve gostot naboja $\vec{\rho} = [\rho_1 \dots \rho_m]$ z neko željeno razporeditvijo gostot naboja $\vec{\kappa} = [\kappa_1 \dots \kappa_m]$, lahko potemtakem izračunamo na osnovi razdalje med točkama $\vec{\rho}$ in $\vec{\kappa}$:

$$\varsigma(\vec{\kappa}) = 1 - \frac{\|\vec{\rho} - \vec{\kappa}\|}{2\sqrt{2}} = 1 - \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^m (\rho_i - \kappa_i)^2}}{2\sqrt{2}}, \quad (5.3)$$

pri čemer je $2\sqrt{2}$ maksimalna oddaljenost dveh točk, ki še predstavljata možno stanje celice z dvema elektronoma.

Razporeditve, ki predstavljajo željena stanja A, B, C in D lahko po vrsti zapišemo kot $\vec{\alpha} = [0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]$, $\vec{\beta} = [1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]$, $\vec{\gamma} = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 0]$ in $\vec{\delta} = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 1]$. Za vsakega izmed njih lahko izračunamo stopnjo ujemanja s trenutnim stanjem obravnavane celice: $\varsigma(\vec{\alpha})$, $\varsigma(\vec{\beta})$, $\varsigma(\vec{\gamma})$ in $\varsigma(\vec{\delta})$. S stališča procesiranja je rezultat tisto izmed željenih stanj, ki se s trenutnim stanjem najbolj ujema.

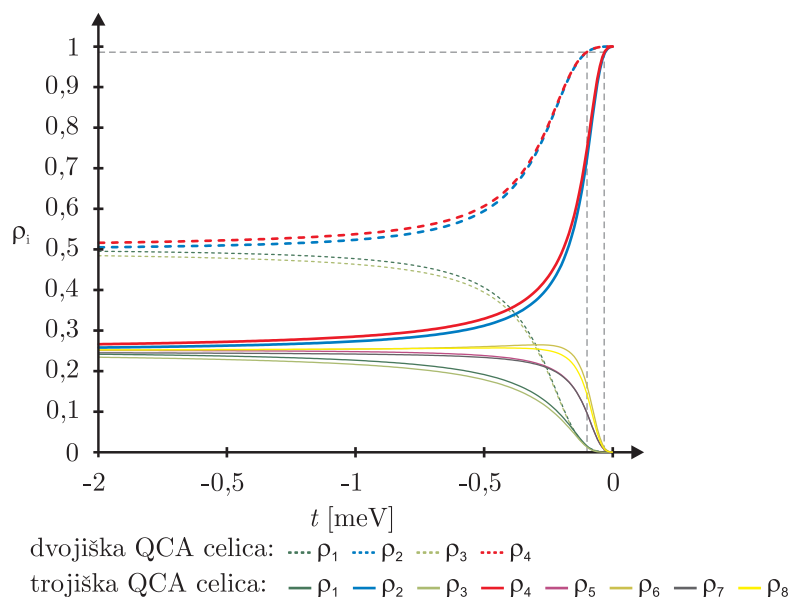
Poudariti je treba, da za razliko od stopnje ujemanja vektor $\vec{\rho}$ natančno opisuje stanje celice. Stopnja ujemanja izračunana po enačbi (5.3) podobno kot Lentova polarizacija tudi ni bijektivna funkcija. Kljub temu je opisana mera enostavnejša za uporabo v primeru QCA celic z večjim številom kvantnih pik in ker ni vezana na idealizirano diagonalno razporeditev gostot naboja razširljiva na poljubno število željenih stanj.

5.3 Osnovne procesne strukture

Dejali smo že, da je bistvo procesiranja s QCA v preslikavi problema iskanja logične rešitve v problem iskanja razporeditve celic, ki bi izvedla ustrezno transformacijo podatkov. Lebar Bajec je pri tem ubral najbolj neposreden pristop. Glede na definicijo nove trojiške QCA celice, kot razširitve dvojiške QCA celice, je predstavljala osnovno vodilo predpostavka, da QCA strukture uporabljene za implementacijo dvojiške linije in dvojiških logičnih operatorjev lahko ob zamenjavi osnovnega gradnika uporabimo za implementacijo trojiške linije in trojiških logičnih operatorjev [45]. V smislu analize obnašanja trojiških struktur se je oprl na Lukasiewiczov trovrednostni logični sistem [46]. Enak pristop je uporabljen tudi v pričujočem delu.

5.3.1 Vpliv tunelirne energije

Izbira vrednosti parametra tunelirne energije t vpliva na uspešnost preslikave oz. prenosa stanja ene celice (npr. gonilnika) na sosednjo celico. Primerna vrednost parametra namreč omogoča robustno preslikavo stanja celice in s tem učinkovito delovanje osnovne strukture za prenos podatkov, torej tQCA linije. Pri tem je robustnost obravnavana v smislu neobčutljivosti preslikave na manjša odstopanja lokalizacije elektronov, torej manjša odstopanja stopnje ujemanja z željenim stanjem celice, ki v danem trenutku vpliva na sosednjo celico. Skratka v primeru popolne neobčutljivosti se bo stanje prve celice preslikalo na drugo tako, da bo stopnja ujemanja z željenim stanjem druge celice enaka ali večja od prve. V ta namen smo za dvojiško in trojiško QCA celico preverili odvisnost lokalizacije elektronov v posamezni kvantni piki od parametra t ter ju medsebojno primerjali. Uporabili smo model interakcije dveh celic predstavljen v poglavju 4.2.3. Leva celica ima vlogo gonilnika v stanju A in se tekom simulacije ne spreminja. Desni celici pa smo spreminjali vrednost parametra t ter za vsako spremembo izračunali gostoto naboja ρ_i . Graf gostote naboja v posamezni kvantni piki v odvisnosti od parametra t za dvojiško in trojiško QCA celico je podan na sliki 5.5. Osnovno vodilo izbire je taka vrednost parametra t , ki bi omogočala opisano robustno preslikavo stanja celice in hkrati ostala v okviru vrednosti, ki jih je Lent predstavil tekom svojih raziskav. Večkratni poskusi so pokazali, da je primerna vrednost $t = -0,03 \text{ meV}$. Na sliki 5.5 vidimo, da v primeru trojiške celice z dano vrednostjo dosežemo približno 98% gostoto naboja v kvantnih pikah 2 in 4, kar pomeni malo odstopanja od idealnega stanja A, ki ga je izkazoval



Slika 5.5 Odvisnost gostote naboja v posamezni kvantni piki, ρ_i , od tunelirne energije t v primeru dvojiške in trojiške QCA celice.

gonilnik. Primerljiva vrednost parametra za dvojiško celico je $t = -0,1$ meV, kar je v okviru vrednosti, ki jih je predstavil Lent v [32].

5.3.2 Prevajalna funkcija interakcije dveh celic

Podobno, kot v primeru dvojiških QCA celic smo prevajalno funkcijo interakcije dveh trojiških QCA celic izračunali na podlagi modela predstavljenega v poglavju 4.2.3. Recimo, da celica X igra vlogo gonilnika, celica Y pa vlogo opazovane celice, ki se odziva na spremembe stanja gonilnika. Gonilniku spreminjamo gostoto naboja v posameznih kvantnih pikah tako, da prehaja iz enega stanja v drugega preko nevtralnega stanja. Izračun gostote naboja v kvantnih pikah izhaja iz pristopa, ki ga je Lent uporabil v svojih poizkusih. Torej gostota naboja v pikah, ki so na nasprotnih straneh glede na središče celice, se spreminja enakovredno, kar pomeni, da pike, ki pripadajo isti diagonali, vertikali ali horizontali vsebujejo vedno enako gostoto naboja.

V primeru dvojiške celice je izračun gostote naboja dokaj enostaven, saj povečevanje gostote naboja v kvantnih pikah vzdolž ene diagonale, enakovredno zmanjšuje gostoto naboja v kvantnih pikah nasprotne diagonale. Izhajamo iz nevtralnega stanja celice. V tem stanju je lokalizacija elektrona enako verjetna v katerikoli kvantni piki, kar pomeni,

da je gostota naboja $\rho_i = \rho_+$, $\forall i$. Proces postopne lokalizacije elektronov preko ene izmed diagonal lahko potem zapišemo kot

$$\rho_D = \rho_+ + s(1 - \rho_+) \quad \text{in} \quad \rho_{ND} = 1 - \rho_D, \quad (5.4)$$

kjer $s \in [0, 1]$ določa stopnjo izpolnjenosti obravnavane diagonale, ρ_+ gostoto pozitivnega naboja, ρ_D gostoto naboja v kvantnih pikah, ki pripadajo obravnavani diagonalni (npr. 1 in 3), ρ_{ND} pa gostoto naboja v kvantnih pikah, ki obravnavani diagonalni ne pripadajo (npr. 2 in 4).

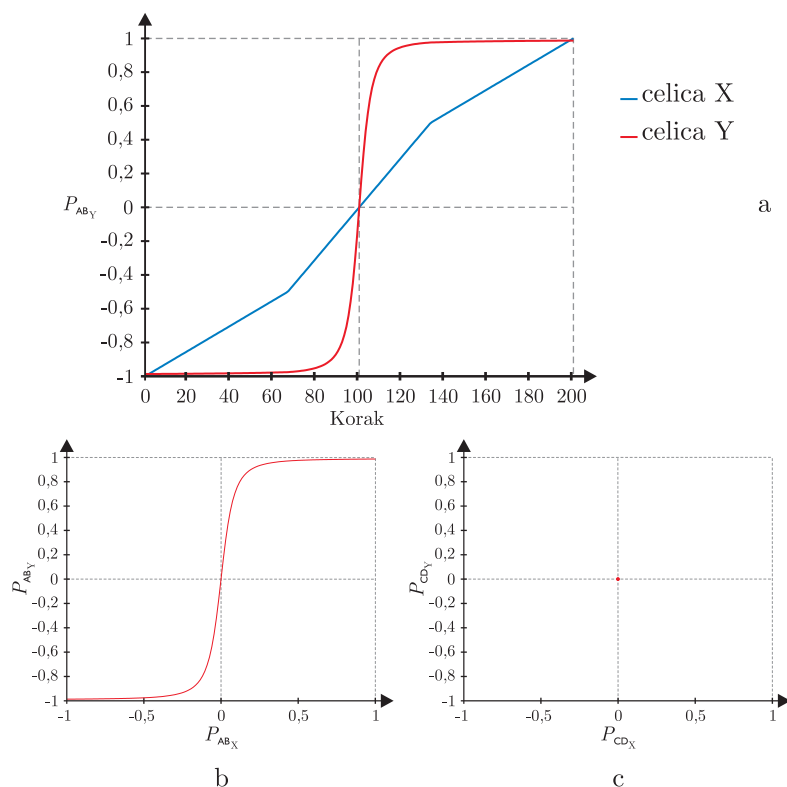
Obravnava trojiške celice je nekoliko bolj zahtevna, saj se število kvantnih pik in s tem možnih lokacij naboja podvoji. Problem predstavlja izračun gostote naboja v kvantnih pikah, ki ne pripadajo trenutno obravnavani diagonalni, horizontalni ali vertikalni. Namreč, gostota naboja v teh pikah ni enakomerno razporejena, pač pa se zmanjšuje z oddaljenostjo od pik, ki pripadajo obravnavani diagonalni, vertikalni ali horizontalni. Na primer, če obravnavamo diagonalno, ki ji pripadata kvantni piki 2 in 4, opazimo da povečevanje gostote naboja v danih pikah povzroči zmanjševanje gostote naboja najprej v pikah 1 in 3, šele zatem pa v pikah 5, 6, 7 in 8. Za potrebe izračuna prevajalne funkcije razširimo sistem enačb (5.4) ter tako spremembo gostote naboja v posamezni kvantni piki podamo kot

$$\rho_D = \rho_+ + s(1 - \rho_+) \quad \text{in} \quad \rho_{BD} = \min\left(\rho_+, \frac{1 - \rho_D}{2}\right) \quad \text{in} \quad \rho_{ND} = \max(0, \rho_+ - s(1 - \rho_+)), \quad (5.5)$$

kjer je ρ_D podaja gostoto naboja v kvantnih pikah, ki pripadajo obravnavani diagonalni, ρ_{BD} gostoto naboja v kvantnih pikah, ki so blizu tej diagonalni, ρ_{ND} gostoto naboja v kvantnih pikah, ki pripadajo nasprotni diagonalni.

Upošteva je enačbo (5.5) izvedemo prehod gonilnika iz stanja A v stanje B. Tega opišemo s trojiško polarizacijo na naslednji način: $[-1; 0] \longrightarrow [0; 0] \longrightarrow [+1; 0]$. Prevajalna funkcija, ki jo dobimo z opazovanjem odziva celice Y glede na stanje celice X je prikazana na sliki 5.6a. Izkaže se, da celica Y sledi spremembi stanja gonilnika X. Še več, prevajalna funkcija je močno nelinearna funkcija v okviru prehoda iz stanja A v stanje B in obratno, kar pomeni, da že manjša polarizacija gonilnika X v smeri enega od obeh stanj povzroči močno polarizacijo sosednje celice Y v enako stanje (slika 5.6b). Po drugi strani pa je polarizacija P_{CD} ves čas prehoda enaka 0 ter tako ne vnaša nezaželenih napak pri prenosu stanja (slika 5.6c).

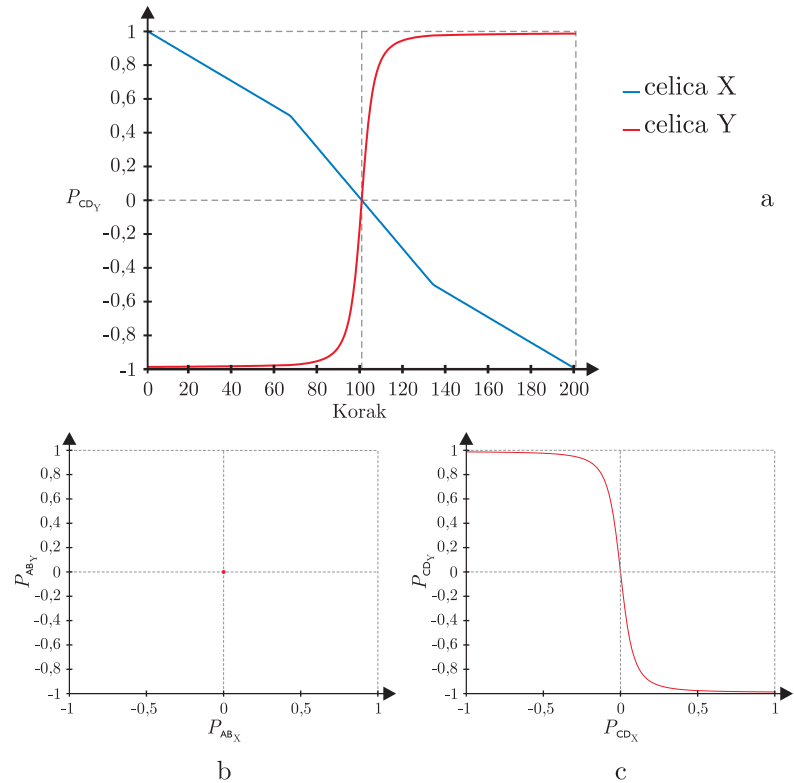
Podobno izvedemo tudi prehod gonilnika iz stanja C v stanje D. Opisano s trojiško



Slika 5.6 Prevajalna funkcija interakcije dveh tQCA celic pri prehodu celice X med stanji A in B (a). Prehod je bil izveden postopoma, pri čemer smo v vsakem koraku po enačbi (5.5) določili polarizacijo celice X (modra krivulja) ter opazovali spremembo polarizacije celice Y (rdeča krivulja). Grafa (b) in (c) pa, po vzoru prikaza na sliki 2.6, podajata odvisnost polarizacije P_{AB} celice Y od celice X ter polarizacije P_{CD} celice Y od celice X.

polarizacijo to pomeni $[0; +1] \rightarrow [0; 0] \rightarrow [0; -1]$. Ustrezna prevajalna funkcija je prikazana na sliki 5.7a. V tem primeru celica Y podobno močno nelinearno sledi spremembi stanja gonilnika X, s to razliko, da zavzema ravno nasprotno polarizacijo. Torej, že manjša polarizacija gonilnika X v smeri enega od stanj C ali D povzroči močno polarizacijo celice Y v nasprotno stanje (npr. polarizacija gonilnika X v smeri stanja C povzroči polarizacijo celice Y v smeri stanja D in obratno; slika 5.7c). Polarizacija P_{AB} pa ostaja ves čas prehoda enaka 0 (slika 5.7b).

Podobne prevajalne funkcije dobimo tudi v primeru prehodov v obeh smereh med stanji A in C, A in D, B in C ter B in D. Hitro zasičenje prevajalne funkcije pri prehodih med poljubnimi štirimi stanji opravlja vlogo ojačevalca stanja, kar je zaželjena kvaliteta pri gradnji robustnih, na šum neobčutljivih, struktur. Obenem pa dolgotrajna zasičenost v posameznem stanju poenostavi njegovo razpoznavnost in s tem preslikavo v ustrezno



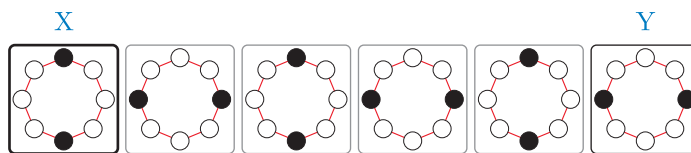
Slika 5.7 Prevajalna funkcija interakcije dveh trojiških QCA celic pri prehodu gonilnika med stanji C in D (a). Prehod je bil izveden postopoma, pri čemer smo v vsakem koraku po enačbi (5.5) določili polarizacijo celice X (modra krivulja) ter opazovali spremembo polarizacije celice Y (rdeča krivulja). Grafa (b) in (c) pa, po vzoru prikaza na sliki 2.6, podajata odvisnost polarizacije P_{AB} celice Y od celice X ter polarizacije P_{CD} celice Y od celice X.

logično vrednost.

5.3.3 Linija

Podobno kot v primeru linije dvojiških QCA celic tudi niz s stranicami poravnanih tQCA celic omogoča prenos podatkov. Če prvi celici X vsilimo stanje A ali B, se to propagira vzdolž linije dokler vse celice ne dosežejo enakega stanja, kar se popolnoma ujema s prevajalno funkcijo prikazano na sliki 5.6. Po drugi strani pa se, v skladu s prevajalno funkcijo na sliki 5.7, celici X vsiljeno stanje C ali D prenaša vzdolž linije alternirajoče, npr. CDCDC... (glej sliko 5.8). Nelinearnost prevajalnih funkcij predstavljenih v prejšnjem poglavju omogoča, podobno kot v primeru linije dvojiških QCA celic, neobčutljivost na manjše razlike v razporeditvi naboja vzdolž diagonal, horizontale ali vertikale.

Interpretacija stanja A kot logične vrednosti 0 in stanja B kot logične vrednosti 1 nam

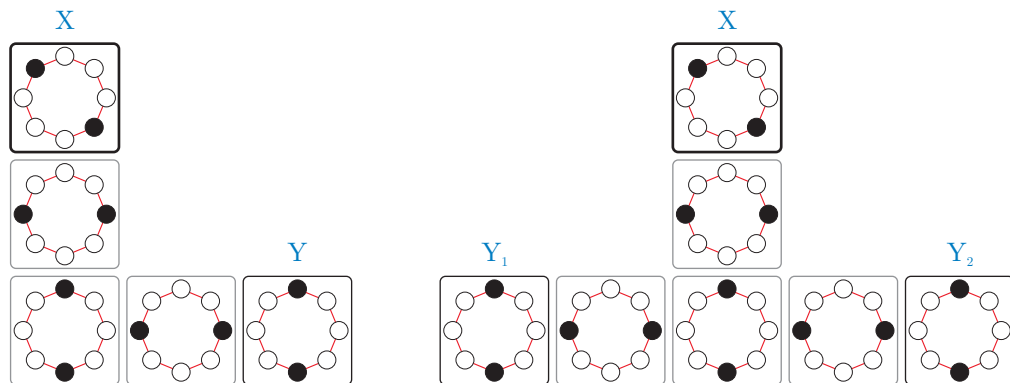


Slika 5.8 Obnašanje trojiške linije v primeru vsiljenega stanja C v celici X. Vidimo, da se stanji C in D izmenjujeta vzdolž linije.

razkrije, da je nova linija sposobna prenašati dvojiške podatke in tako je ekvivalentna liniji predstavljeni v poglavju 2.5.1. Obravnavnava stanj C in D kot trojiške logične vrednosti $\frac{1}{2}$ pa nam razširi funkcionalnost linije, saj je ta sedaj sposobna prenašati trojiške podatke. Torej linija realizira preklopno funkcijo podano z logično enačbo (2.4), s to razliko, da je sedaj x trojiška logična vrednost, ki ustreza stanju gonilnika X in y trojiška logična vrednost, ki ustreza stanju izhodne celice Y. Zaradi tega ji pravimo tudi tQCA oz. trojiška linija (angl. *tQCA wire*, *ternary wire*).

Geometrija tQCA celice izniči lastnosti diagonalne izvedbe linije in s tem tudi pravokotno križanje linij v isti ravnini predstavljeno v poglavju 2.5.1. Tako predpostavljamo, da je križanje linij mogoče le v primeru večnivojske izvedbe strukture.

Na žalost tudi kotna in razvejitvena linija ne delujeta več pravilno. Začetni poskusi na osnovi polklasičnega modela so nakazovali, da kotna linija deluje pravilno, torej da je osnovno stanje dejansko tudi procesno pravilno stanje. Natančnejši poskusi s posplošenim Hubbardovim modelom pa so razkrili, da je energijska razlika med osnovnim stanjem in prvim vzbujenim stanjem izredno majhna. Posledično je struktura izredno nestabilna. Kotna linija se, v primeru vhodnih stanj A ali B, tako preklopi v procesno nepravilno stanje, ki je prikazano na sliki 5.9. Problem se pojavi zaradi medsebojnih vplivov med celicami v kotnem delu linije. Ti privedejo do konfliktne situacije na katero so opozarjali že raziskovalci, ki so natančneje obravnavali dvojiško kotno linijo. Gledano od vhodne celice X proti izhodni celici Y, druga celica prevzame stanje vhodne celice in vsiljuje isto stanje tudi tretji celici. Četrta celica pa zaradi diagonalne poravnosti z drugo skuša zasesti ravno nasprotno stanje. Seveda tega stanja zaradi vpliva tretje celice ne more doseči, tako se elektrona četrte celice lokalizirata v kvantnih pikah 6 in 8, kar ustreza stanju D. Stanje četrte celice se prične favorizirati nazaj na tretjo in posledično na drugo celico, poleg tega pa tudi na izhodno celico Y, kar privede do procesno nepravilnega rezultata. V primeru vhodnih stanj C ali D kotna linija deluje pravilno, saj vrednosti



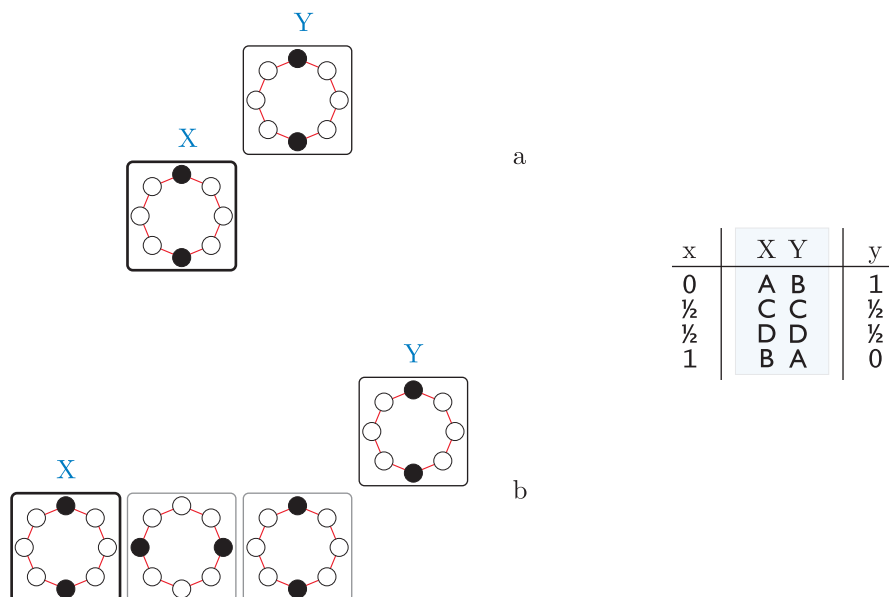
X	Y	X Y ₁ Y ₂		
A	C	A	C	C
C	C	C	C	C
D	D	D	D	D
B	C	B	C	C

Slika 5.9 Nepravilnosti v delovanju kotne in razvejitvene linije ter tabelarična predstavitev njenega obnašanja.

alternirata ter tako ne povzročata konfliktno situacije. Podoben problem se pojavi tudi v primeru razvejitvene linije. Tu je konflikt med štirimi celicami, na območju kjer se linija razveji, še večji v primerjavi s kotno linijo. Kot je razvidno iz slike 5.9 se, enako kot v primeru kotne linije, problem pojavi ob vhodnih stanjih A in B, medtem ko se vhodni stanji C in D prenašata pravilno.

5.3.4 Operacija negacije

Lebar Bajec je sledeč ideji o zamenjavi osnovnih gradnikov nadgradil tudi osnovno strukturo negatorja predstavljeno v poglavju 2.5.2. Svoje raziskave je osredotočil le na jedro negatorja (glej sliko 5.10a) in ugotovil, da to deluje pravilno. Torej v primeru stanja A vhodne celice X izkazuje izhodna celica Y stanje B in obratno. Torej se obnaša enako kot dvojiški negator. V primeru vhodnih stanj C in D pa ostanejo stanja na izhodni celici nespremenjena. Simulacije na osnovi posplošenega Hubbardovega modela so se ujemale z izsledki, ki jih je predstavil Lebar Bajec. Ugotovili smo tudi, da podaljševanje vhodnega dela (glej sliko 5.10b) ne povzroča težav, seveda pa je zaradi alterniranja stanj C in D potrebno ohranjati sodo število celic.



Slika 5.10 Osnovna izvedba trojiškega negatorja (a) in podaljšanje vhodnega dela (b). Obnašanje struktur, v tabeli označeno z modrim kvadratom, se popolnoma ujema s pravilnostno tabelo trojiške negacije.

V okviru Lukasiewiczzeve trojiške logike predstavimo operacijo negacije z enačbo

$$y = \bar{x} \equiv 1 - x, \quad (5.6)$$

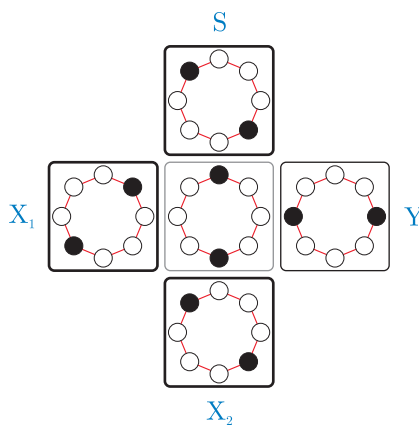
kjer sta logični vrednosti $x, y \in \{0, \frac{1}{2}, 1\}$. Če logična vrednost x ustreza stanju gonilnika X in logična vrednost y stanju izhodne celice Y vidimo, da struktura opravlja operacijo trojiške negacije (glej tabelo na sliki 5.10).

Nasprotno pa so naše raziskave pokazale, da izhodnega dela ne smemo podaljševati, saj to povzroči napačno oz. izredno nestabilno delovanje strukture. Velikokrat se zgodi, da tekom preklopa celica, ki sledi celici Y na sliki 5.10a favorizira stanje C ter ga postopoma vsili tudi svoji predhodnici in naslednici. Dano dogajanje je izredno nestabilno in močno odvisno od izbire začetnih stanj celic ter parametra tunelirne energije t , saj ta vpliva na grobost preklopa. Zaradi opisanih problemov neposredni ekvivalent strukture dvojiškega negatorja (glej sliko 2.12) ni mogoč.

5.3.5 Operacija konjunkcije in disjunkcije

Zamenjava osnovnega gradnika majoritetnih vrat, ki se uporabljajo za realizacijo dvojiških IN ter ALI logičnih funkcij in so bila predstavljena v poglavju 2.5.3, pa se je izkazala

za nekoliko bolj problematično. Rezultati simulacije nove strukture¹ (glej sliko 5.11) na



Slika 5.11 Nova struktura majoritetnih vrat, dobljena z zamenjavo osnovnega gradnika, ne opravlja vloge trojiške majoritetne funkcije in ne omogoča neposredne izvedbe operatorjev trojiške konjunkcije in disjunkcije.

osnovi posplošenega Hubbardovega modela se ujemajo z rezultati, ki jih je pridobil Lebar Bajec s pomočjo polklasičnega modela in so zbrani v tabeli 5.1.

Na žalost obnašanja novih majoritetnih vrat ni moč neposredno opisati z enačbami Lukasiewiczzeve trojiške logike ter tako logično izpeljati strukture, ki bi opravljala logični operaciji trojiške konjunkcije in disjunkcije. Lukasiewiczzeva trojiška logika namreč podaja konjunkcijo in disjunkcijo z logičnima enačbama:

$$\begin{aligned} y &= x_1 x_2 \equiv \min(x_1, x_2), \\ y &= x_1 \vee x_2 \equiv \max(x_1, x_2), \end{aligned} \tag{5.7}$$

kjer so logične vrednosti $x_1, x_2, y \in \{0, \frac{1}{2}, 1\}$. Če za enačbi (5.7) izpišemo pravilnostno tabelo 5.2 in jo primerjamo s tabelo 5.1 vidimo, da lahko kot kontrolni vhod, ki določa obnašanje strukture, izberemo le vhod S. Namreč, obnašanje strukture ni neodvisno od izbire enega od treh vhodov kot kontrolnega, kakor je to veljalo v primeru dvojiških majoritetnih vrat. Če je stanje vhoda S enako A ter logične spremenljivke x_1, x_2 in y po vrsti ustrezajo stanjem vhodnih celic X_1, X_2 in izhodne celice Y, izkazuje struktura obnašanje podobno trojiški konjunkciji. V primeru, da je stanje vhoda S enako B pa se struktura obnaša podobno trojiški disjunkciji. Opisana primera sta označena v tabeli na sliki 5.1. Omejitev glede izbire kontrolnega vhoda pa vnaša še več problemov, saj

¹Zaradi enostavnosti jo bomo še vedno imenovali majoritetna vrata, čeprav struktura v smislu trojiške logike te funkcije ne opravlja.

S X ₁ X ₂ Y	S X ₁ X ₂ Y	S X ₁ X ₂ Y	S X ₁ X ₂ Y
A A A A	B A A A	C A A A	D A A D
A A C A	B A C C	C A C C	D A C A
A A D D	B A D D	C A D A	D A D D
A A B A	B A B D	C A B C	D A B D
A C A A	B C A C	C C A C	D C A D
A C C C	B C C C	C C C C	D C C C
A C D D	B C D D	C C D C	D C D D
A C B C	B C B B	C C B C	D C B D
A D A D	B D A D	C D A A	D D A D
A D C A	B D C B	C D C C	D D C D
A D D D	B D D D	C D D D	D D D D
A D B D	B D B D	C D B B	D D B D
A B A D	B B A B	C B A C	D B A D
A B C C	B B C B	C B C C	D B C B
A B D D	B B D D	C B D B	D B D D
A B B B	B B B B	C B B B	D B B D

$y=IN(x_1, x_2)$
 $y=ALI(x_1, x_2)$

Tabela 5.1 Obnašanje nove strukture majoritetnih vrat, ki jo dobimo z zamenjavo osnovnega gradnika, pri vseh možnih vhodnih kombinacijah. Opazimo, da le delno realizira operacije trojiške konjunkcije in disjunkcije.

x_1 x_2	$IN(x_1, x_2)$	$ALI(x_1, x_2)$
0 0	0	0
0 ½	0	½
0 1	0	1
½ 0	0	½
½ ½	½	½
½ 1	½	1
1 0	0	1
1 ½	½	1
1 1	1	1

Tabela 5.2 Pravilnostna tabela trojiške konjunkcije in disjunkcije, kot jih je podal Lukasiewicz.

se pretežni del vseh možnih vhodnih kombinacij v tabeli na sliki 5.1 sploh ne ujema z enačbo (5.7).

Lebar Bajec je tako stanje D določil kot notranje procesno stanje, torej stanje, ki je dovoljeno le na delovnih celicah, nikakor pa ne na vhodnih ali izhodnih celicah neke procesne strukture. Dano omejitev lahko enostavno dosežemo. Pri tem se moramo zavedati, da smo s tem dolžino linije omejili na liho število tQCA celic, saj je le tako stanje izhodne celice enako stanju vhodne celice tudi v primeru vhodnih stanj C in D. Obnašanje majoritetnih vrat, ki upoštevajo opisane omejitve je predstavljeno v tabeli 5.3. Pripadajoča pravilnostna tabela je zelo podobna pravilnostni tabeli trojiške konjunkcije in disjunkcije (glej tabelo 5.2). Edini dve problematični vhodni kombinaciji sta $IN(1,0)$ in $ALI(0,1)$

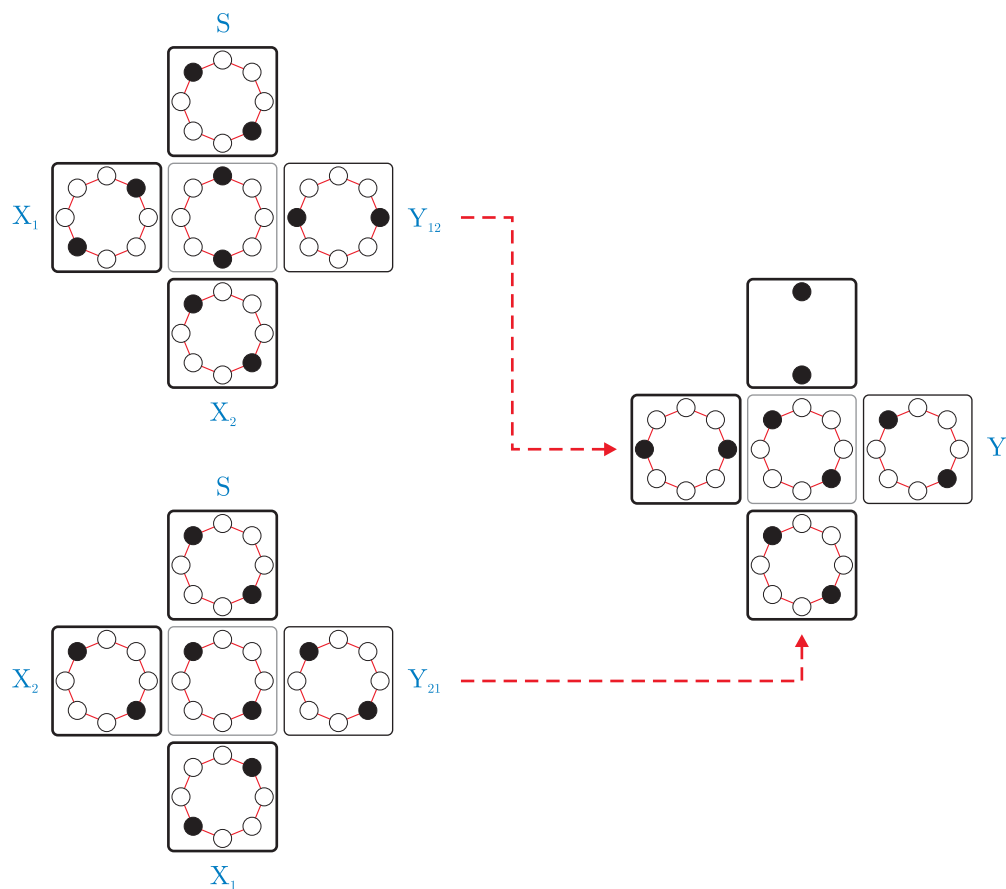
	x_1	x_2	S	X_1	X_2	Y	y
IN(x_1, x_2)	0	0	A	A	A	A	0
	0	$\frac{1}{2}$	A	A	C	A	0
	0	1	A	A	B	A	0
	$\frac{1}{2}$	0	A	C	A	A	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	A	C	C	C	$\frac{1}{2}$
	$\frac{1}{2}$	1	A	C	B	C	$\frac{1}{2}$
	1	0	A	B	A	D	0
	1	$\frac{1}{2}$	A	B	C	C	$\frac{1}{2}$
	1	1	A	B	B	B	1
	ALI(x_1, x_2)	0	0	B	A	A	A
0		$\frac{1}{2}$	B	A	C	C	$\frac{1}{2}$
0		1	B	A	B	D	1
$\frac{1}{2}$		0	B	C	A	C	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$	B	C	C	C	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$		1	B	C	B	B	1
1		0	B	B	A	B	1
1		$\frac{1}{2}$	B	B	C	B	1
1		1	B	B	B	B	1

Tabela 5.3 Obnašanje strukture trojiških majoritetnih vrat, ki upošteva omejitve izbire kontrolnega vhoda ter stanja D kot notranjega procesnega stanja in pripadajoča pravilnostna tabela, ki se le v primerih vhodnih kombinacij IN(1,0) in ALI(0, 1) razlikuje od pravilnostne tabele trojiške konjunkcije in disjunkcije.

saj obe vračata nedovoljeno izhodno stanje D in obenem neustrezno logično vrednost $\frac{1}{2}$.² Na srečo se izhodno stanje D pojavi le pri opisanih dveh vhodnih kombinacijah. Še več, simetrični vhodni kombinaciji glede na vhodne celice X_1 in X_2 , torej kombinaciji IN(0,1) in ALI(1,0) dajeta pravilen rezultat. Omenjeni dejstvi je Lebar Bajec izkoristil za izvedbo strukture, ki bi realizirala iskani logični funkciji [25].

Rešitev je zasnovana na strukturi para majoritetnih vrat z enakimi vhodi S, X_1 , X_2 , pri čemer imajo ena zamenjana vhoda X_1 in X_2 . Omenjeni par nam zaradi simetričnosti IN ter ALI logičnih funkcij pri večini vhodnih kombinacij vrne enaki izhodni vrednosti. Do razlik na izhodih prihaja le v primerih IN(0,1), IN(1,0) ter ALI(0,1), ALI(1,0). Tedaj velja, da izhodna celica ene od obeh struktur izkazuje stanje D, izhodna celica druge strukture pa izkazuje pravilno stanje. Iz tega sledi, da potrebujemo dodatno strukturo, ki bo v primeru enakega stanja vhodnih celic to stanje prenesla na izhodno celico, v primeru stanja D na eni od vhodnih celic pa prenesla na izhod stanje druge vhodne celice. Študija obnašanja majoritetnih vrat podana v tabeli 5.1 razkrije, da so ustrezna struktura znova majoritetena vrata pri katerih je vhod S v stanju C. Celotna struktura, ki pravilno realizira logični funkciji trojiške konjunkcije in disjunkcije, je torej implementirana kot hierarhija treh majoritetnih vrat. Njen shematski prikaz je podan na sliki 5.12.

²Problematična konjunkcija je predstavljena tudi na sliki 5.11.



Slika 5.12 Shema implementacije trojiške konjunkcije in disjunkcije, kot hierarhije treh majoritetenih vrat.

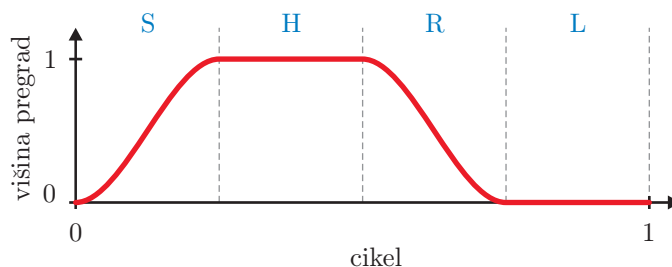
5.4 Uporaba adiabatsnega modela

Dejstvo, da se je velikost strukture, ki izvaja operacije trojiške konjunkcije in disjunkcije najmanj trikratno povečala, je predstavljalo eno glavnih motivacij za prehod na adiabatsno kontrolo trojiških QCA struktur. Operaciji konjunkcije in disjunkcije sta namreč eni izmed osnovnih logičnih operacij, t.i. primitiva, s pomočjo katerih lahko gradimo kompleksne kombinatorične in sekvenčne strukture. Velika kompleksnost primitivov lahko močno oteži gradnjo in tako zmanjša njeno smotrnost. Poleg tega pa adiabatsna kontrola prenosa podatkov močno poenostavlja realizacijo osnovnih pomnilnih struktur [12, 28, 47, 48].

Začetni pristop je slonel na temeljih in spoznanjih, ki jih je predstavil Lent v okviru svojih poskusov uvedbe adiabatsne kontrole prenosa podatkov (glej poglavji 3.2 in 4.2.5).

Na žalost so poizkusi kontrole prenosa podatkov po trojiški liniji pokazali, da je urin signal, ki se uporablja za kontrolo dvojiških struktur, pregrob. Največji problem predstavlja faza preklopa (S). Namreč, dani urin signal spreminja parameter t linearno, kar povzroča prehiter prehod celic v fazo zadrževanja ter posledično možno nepravilno lokalizacijo elektronov. Zaplet smo deloma tudi pričakovali, saj ga hitro razkrije tudi primerjava poteka urinega signala v fazi preklopa (glej sliko 3.2) z grafom odvisnosti gostote naboja od tunelirne energije t (glej sliko 5.5). Če vrednostma višine pregrad 0 in 1 na sliki 3.2 ustrezata vrednosti -2 in 0 parametra t na sliki 5.5, vidimo, da je odsek urinega signala, ki kontrolira fazo preklopa le grob približek grafa spremembe gostote naboja v kvantnih pikah. Slednji se namreč ne spreminja linearno s spremembo parametra t . Seveda ni kritično celotno območje zaloge vrednosti parametra $t \in [-2, 0]$. Dokler so vrednosti znotraj podintervala $[-2, -0,5]$ se v celici zelo malo dogaja, saj se gostota naboja izredno počasi, skorajda linearno, spreminja. Na podintervalu $[-0,5, 0]$ pa se dogajajo izredno hitre oz. nelinearne spremembe, ki so še bolj opazne pri tQCA celici. Namreč, večje število kvantnih pik, pomeni več možnosti kjer se lahko elektrona trenutno nahajata, tako je njuna lokaliziranost v željenih kvantnih pikah možna šele, ko verjetnost tuneliranja upade oz. ko so potencialne pregrade med kvantnimi pikami dovolj visoke. Po drugi strani pa teorem adiabatnosti zahteva postopen oz. dovolj počasen prekop, ki ohranja sistem v trenutnem osnovnem stanju. S tega stališča je urin signal na sliki 3.2 dovolj dober približek grafu spremembe gostote naboja v kvantnih pikah dvojiške QCA celice. Za trojiško QCA celico pa smo teoremu ugodili z nekoliko spremenjenim urinim signalom.

Njegovo osnovo predstavlja sinusoida, torej periodična krivulja, ki jo lahko dokaj enostavno realiziramo. Osnovno periodo le-te smo razdelili na dva dela, na del ki monotonno narašča in del, ki monotonno pada. Prvi ustreza fazi preklopa (S), drugi pa fazi sproščanja (L). Med njiju pa smo vstavili konstantno funkcijo, katere dolžina je enaka polovici periode sinusoide in ustreza fazi zadrževanja (H). Podobno smo konstantno funkcijo dodali še za monotonno padajočim delom sinusoide, tako da ta ustreza fazi sproščenosti (L). Rezultat je krivulja oz. urin signal prikazan na sliki 5.13. Če se na tej sliki osredotočimo na potek krivulje v problematični fazi preklopa (S) in jo primerjamo s krivuljo spremembe gostote naboja za primer tQCA na sliki 5.5 vidimo, da nov urin signal narašča hitro v območju, ko je sprememba gostote naboja v odvisnosti od parametra t majhna in se upočasni v območju hitre spremembe.



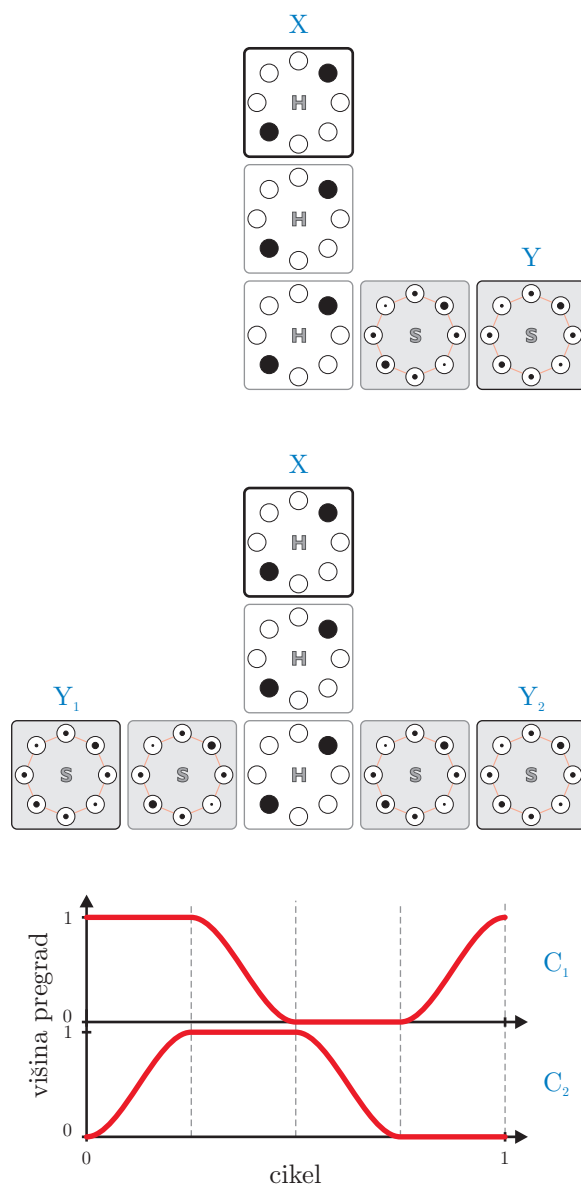
Slika 5.13 Urin signal, ki kontrolira proces adiabatskega preklopa trojiškega QCA.

Rešitvi problema poteka urinega signala je sledila realizacija adiabatske kontrole trojiške linije. Linija se je pričakovano obnašala na enak način kot dvojiška linija. Trojiške podatke je pravilno prenašala tako v primeru kontrole vseh celic³ z enim samim urinim signalom ali pa z več ustrezno fazno zamaknjenimi urinimi signali (glej primer na sliki 3.5). V tem primeru je izkazovala značilno cevovodno obnašanje.

Problema kotne in razvejitvene linije rešimo tako, da konfliktne dele strukture ločimo na dva podsistema, ki ju kontroliramo z dvema fazno zamaknjenima urinima signaloma C_1 in C_2 . Pri tem je signal C_2 zakasnen za četrt cikla glede na C_1 . Prvi podsistem, ki ga kontrolira signal C_1 zajema dohodne celice, torej celice od gonilnika X do vključno konfliktnega mesta, drugi, ki ga kontrolira signal C_2 pa odhodne celice, torej celice med konfliktnim mestom in izhodno celico Y v primeru kotne linije oz. izhodnimi celicami Y_1 in Y_2 v primeru razvejitvene linije. Rešitvi sta podani na sliki 5.14. Če prvi podsistem ne vključuje konfliktnega mesta struktura deluje napačno, podobno kot da kontrole sploh ne bi bilo. Pri tem se zavedamo, da je izhodna vrednost v celici Y oz. celicah Y_1 in Y_2 , ki je za nas veljavna v fazi zadrževanja (H), zakasnjena za četrtino cikla glede na pojavitev vhodne vrednosti v celici X. Ker se izhodna vrednost pojavi pred koncem cikla urinega signala C_1 , ki kontrolira vhodno celico X, lahko adiabatsko kontrolirano kotno linijo in razvejitveno linijo opišemo kot časovno neobčutljivi logični funkciji. Tako deluje kotna linija v skladu z enačbo (2.4), kjer sta $x, y \in \{0, \frac{1}{2}, 1\}$, razvejitvena linija pa v skladu z enačbo (2.6), kjer so $x, y_1, y_2 \in \{0, \frac{1}{2}, 1\}$.

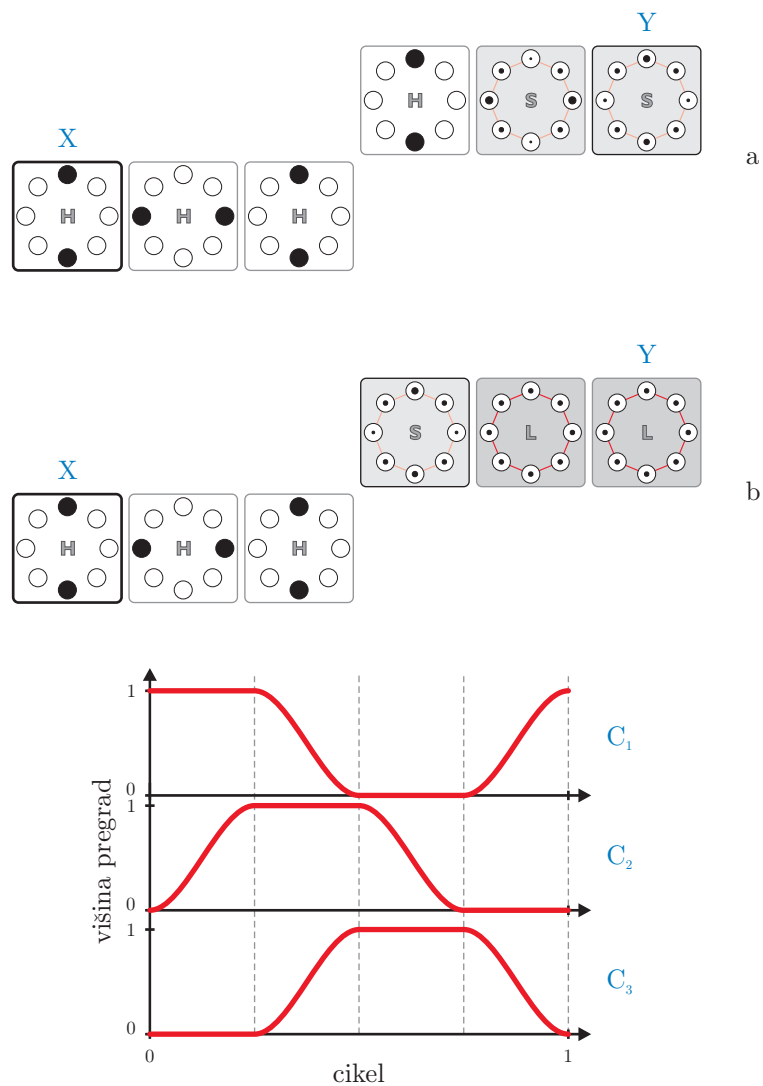
Tudi jedro negatorja (glej sliko 5.10a) in izvedba s podaljšanim vhodnim delom (glej sliko 5.10b) sta delovala pravilno v primeru kontrole z enim samim urinim signalom ali več fazno zamaknjenimi urinimi signali. Problem podaljšanja izhodnega dela negatorja pa

³Poizkus je zajemal linijo dolžine desetih celic.



Slika 5.14 Adiatbatna kontrola kotne in razvejivne linije, ki omogoča njuno pravilno delovanje. Celice, ki so trenutno v fazi zadrževanja (H) kontrolira urin signal C_1 , celice, ki so trenutno v fazi preklopa (S) pa urin signal C_2 .

lahko rešimo na dva načina. Pri prvem načinu podaljšek izhoda obravnavamo kot linijo kontrolirano z urinim signalom, ki je za četrtno cikla zakasnen za kontrolnim signalom negatorja (glej sliko 5.15a). Tako strukturo dejansko razdelimo na dva podsistema, pri



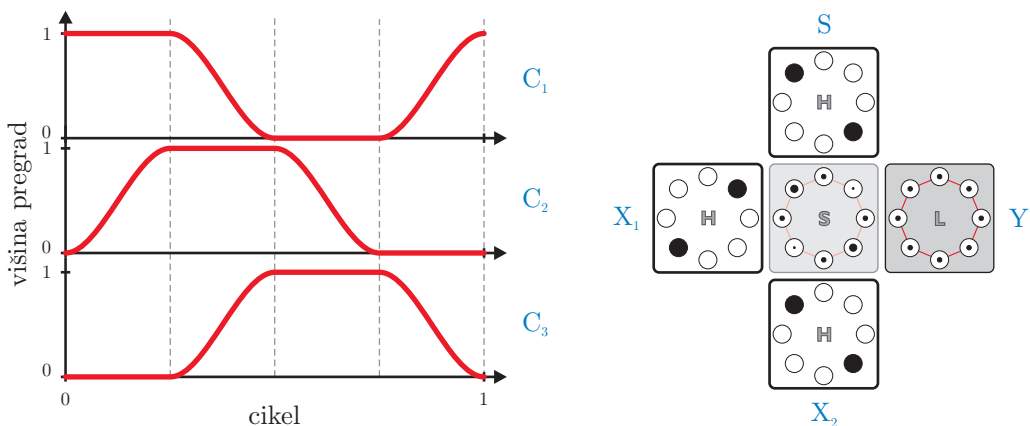
Slika 5.15 Rešitvi problema podaljšanja izhodnega dela negatorja. Celice, ki so trenutno v fazi zadrževanja (H) kontrolira urin signal C_1 , celice, ki so trenutno v fazi preklopa (S) kontrolira urin signal C_2 , celice, ki so trenutno v fazi sproščenosti (L) pa urin signal C_3 .

čemer prvi, ki ga kontrolira signal C_1 , vključuje vhodni del in jedro, torej negator, drugi, ki ga kontrolira signal C_2 , pa podaljšani izhodni del. Drugi način pa zahteva tri kontrolne signale saj strukturo razdelimo na tri podsisteme. Prvi podsistem, ki ga kontrolira signal

C_1 , vključuje vhodni del in vhodno celico jedra, drugi podsistem, ki ga kontrolira signal C_2 , je le izhodna celica jedra, tretji podsistem, ki ga kontrolira signal C_3 pa zajema podaljšani izhodni del (glej sliko 5.15b).

Če strukturi na sliki 5.15 v celoti obravnavamo kot negatorja, se moramo zavedati časovne zakasnitve izhoda glede na vhod. Kljub temu pa lahko, podobno kot kotno linijo, tudi negatorja opišemo kot časovno neobčutljivi logični funkciji z enačbo (5.6), saj je njun izhod aktiven še v istem ciklu.

Rešitev problema majoritetnih vrat, s katerimi želimo čim enostavneje realizirati operaciji konjunkcije in disjunkcije, pa je še nekoliko bolj kompleksna. Zanj potrebujemo kar tri kontrolne urine signale. Kot vidimo na sliki 5.16 urin signal C_1 kontrolira vhodne



Slika 5.16 Adiabatsna kontrola majoritetnih vrat, ki omogoča realizacijo operacij konjunkcije in disjunkcije s strukturo, ki je po velikosti enaka dvojiškemu ekvivalentu. Celice, ki so trenutno v fazi zadrževanja (H) kontrolira urin signal C_1 , celice, ki so trenutno v fazi preklopa (S) urin signal C_2 , celice, ki so v fazi sproščenosti (L) pa urin signal C_3 .

celice, urin signal C_2 kontrolira delovno celico, ta je glede na C_1 zakasnen za četrtno cikla, urin signal C_3 pa kontrolira izhodno celico in je glede na C_2 ravno tako zakasnen za četrtno cikla. Faza zadrževanja izhodne celice, ki določa veljaven rezultat, se pojavi z zakasnitvijo dolžine dveh faz oz. polovice cikla glede na fazo zadrževanja kontrolne ure C_1 , ki določa veljavnost vhodnih vrednosti. Ker je rezultat prisoten v okviru istega cikla signala C_1 , lahko tudi delovanje majoritetnih vrat opišemo z enačbo, ki obravnava časovno neobčutljive logične funkcije.

Obnašanje adiabatsno kontroliranih majoritetnih vrat je podano v tabeli 5.4. Pri tem smo upoštevali omejitvev, ki določa stanje D kot notranje procesno stanje in prepoveduje njegovo pojavitev na vhodnih celicah S, X_1 in X_2 . Primerjava prvih dveh stolpcev dane

S X ₁ X ₂ Y	S X ₁ X ₂ Y	S X ₁ X ₂ Y
A A A A	B A A A	C A A A
A A C A	B A C C	C A C C
A A B A	B A B B	C A B C
A C A A	B C A C	C C A C
A C C C	B C C C	C C C C
A C B C	B C B B	C C B C
A B A A	B B A B	C B A C
A B C C	B B C B	C B C C
A B B B	B B B B	C B B B

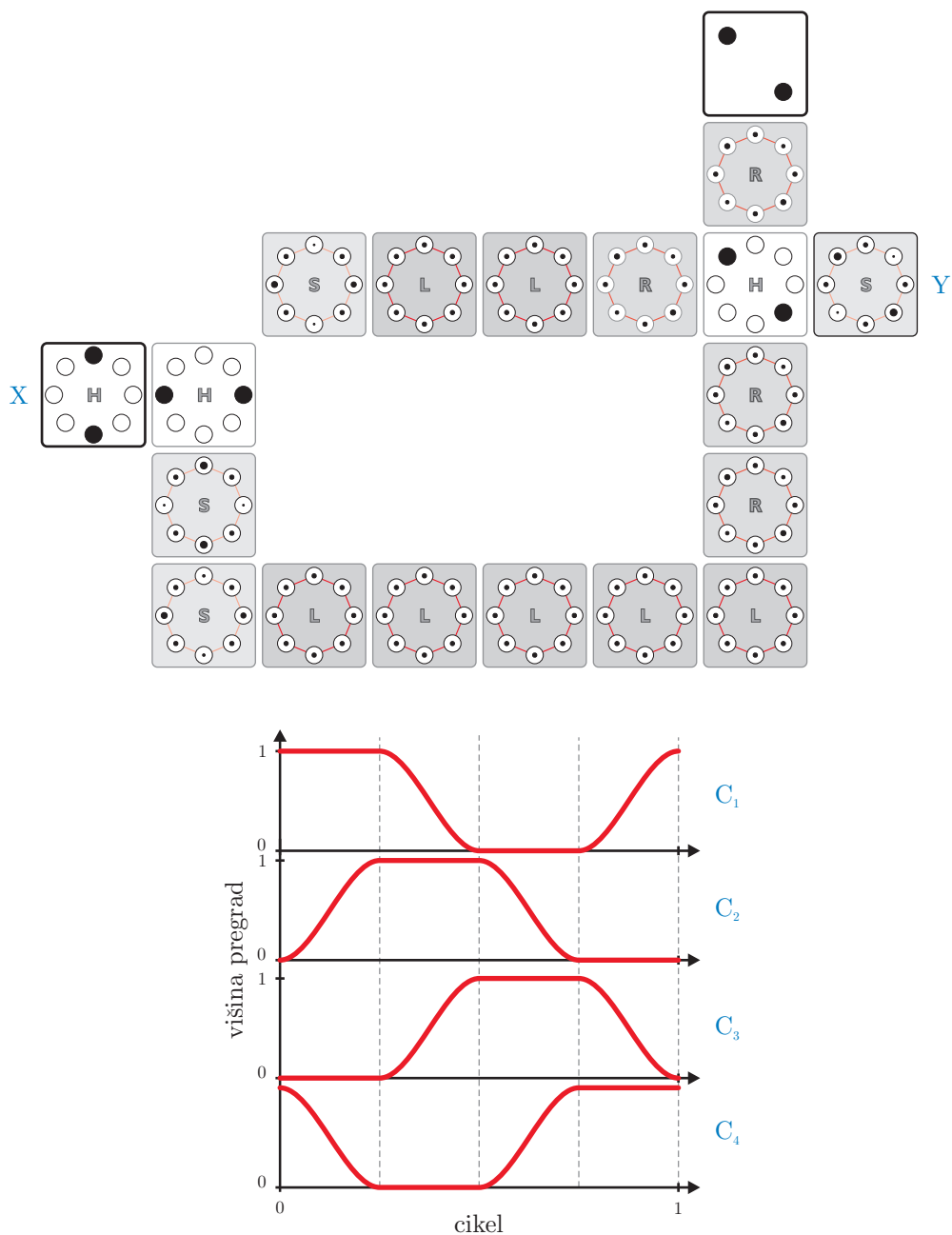
Tabela 5.4 Obnašanje adiabatsno kontroliranih majoritetnih vrat. Izbira vhodnih kombinacij upošteva prepoved pojavitve stanja D na vhodnih celicah.

tabele s tabelo na sliki 5.3 razkriva, da struktura pravilno opravlja operacijo trojiške konjunkcije oz. disjunkcije. Struktura se torej obnaša kot operator konjunkcije v primeru, ko je kontrolni vhod S v stanju A in kot operator disjunkcije v primeru, ko je ta v stanju B. Tako lahko njeno obnašanje opišemo z enačbo (5.7), kjer trojiški logični vrednosti x_1 in x_2 ustrezata stanju vhodnih celic X_1 in X_2 ter trojiška logična vrednost y ustreza stanju izhodne celice Y.

Še več, medsebojna primerjava izhodnih vrednosti glede na vhodne kombinacije v tabeli 5.4 kaže, da izbira kontrolnega vhoda, ki določa funkcijo strukture, ni več omejena le na vhod S temveč lahko za kontrolni vhod izberemo kateregakoli od vhodov S, X_1 in X_2 . Če je stanje izbranega vhoda enako A oz. B se struktura obnaša kot operator konjunkcije oz. disjunkcije med preostalima dvema vhodoma.

Z adiabatsno kontrolo osnovnih gradnikov trojiških procesnih struktur nismo le rešili problemov povezanih z njihovim delovanjem in v primeru majoritetnih vrat najmanj trikratno zmanjšali velikost strukture, temveč smo tudi ohranili združljivost z dvojiškimi ekvivalenti. Opisane strukture lahko služijo kot gradniki tako dvojiških kot tudi trojiških procesnih platform ali pa celo hibridov, ki bi združevali dobre lastnosti obeh.

Primer kompleksnejše strukture zgrajene iz opisanih osnovnih struktur je predstavljen na sliki 5.17. Seveda se moramo zavedati, da se rezultat na celici Y, glede na vhod oz. trenutek, ko je celica X v fazi zadrževanja, pojavi zakasnjeno za več kot dolžino ene periode kontrolnega signala. To pomeni, da struktura izkazuje neko vrsto časovne zakasnitve (pomnjenja). Iz tega sledi, da bomo najbrž morali vse kompleksnejše strukture obravnavati v smislu časovno odvisnih logičnih funkcij, torej s podobnim formalizmom kot ga v CMOS tehniki običajno uporabljamo za obravnavo sekvenčnih vezij.



Slika 5.17 Struktura zgrajena iz adiabatsko kontroliranih osnovnih struktur linije, kotne linije, negatorja in majoritetnih vrat, ki opravlja trojiško funkcijo $y = x\bar{x}$. Celice, ki so trenutno v fazi zadrževanja (H) kontrolira urin signal C₁, celice, ki so trenutno v fazi preklopa (S) urin signal C₂, celice, ki so trenutno v fazi sproščenosti (L) urin signal C₃ ter celice, ki so trenutno v fazi sproščanja (R) pa urin signal C₄.

6 Zaključek

Z nadgradnjo osnovnega gradnika dvojiških kvantnih celičnih avtomatov, ki jih je Lent predstavil v začetku devetdesetih let prejšnjega stoletja, je Lebar Bajec s sodelavci pokazal na možnost uporabe QCA platforme za podporo trojiški logiki. Trojiška QCA celica omogoča namesto dveh štiri energijsko ekvivalentne razporeditve elektronov in s tem štiri možna stanja. Dve stanji sta enaki stanjema Lentove dvojiške celice in sta interpretirani kot logična 0 oz. logična 1, drugi dve pa predstavljata tretjo logično vrednost $\frac{1}{2}$. Avtorji so pri iskanju razporeditve tQCA celic, ki bi izvedla ustrezno transformacijo podatkov, ubrali najbolj neposreden pristop. Osnovno vodilo je predstavljala predpostavka, da QCA strukture uporabljene za implementacijo dvojiške linije in dvojiških logičnih operatorjev lahko ob zamenjavi osnovnega gradnika uporabijo za implementacijo trojiške linije in trojiških logičnih operatorjev. Tako so avtorji pokazali, da strukturi linije in delno negatorja ohranita celotno funkcionalnost ter ustrezata trojiškim logičnim enačbam. Na žalost pa to ni veljalo za osnovno geometrijo strukture, ki realizira trojiški logični funkciji konjunkcije in disjunkcije. Omenjeni problem so avtorji rešili z nadgradnjo strukture, ki je v primerjavi z njenim dvojiškim ekvivalentom zavzemala vsaj trikrat več prostora in

ni omogočala fleksibilne uporabe vhodov.

V magistrski nalogi smo predstavili primer odprave nastalih problemov na osnovi pristopa adiabatsnega preklapljanja. Njegova izbira je izhajala iz prednosti, ki so jih predstavili raziskovalci v okviru dvojiških QCA struktur. Bistveni dve sta povečanje stabilnosti delovanja QCA in poenostavitev gradnje pomnilnih QCA struktur. Pristop temelji na kvantno mehanski različici teorema adiabatsnosti. Ta pravi, da izvedba postopnega in dovolj počasnega preklopa sistema med dvema energijsko osnovnima stanjema zagotavlja, da sistem ves čas preklopa ostaja v trenutnem energijskem osnovnem stanju. V primeru QCA opisanemu teoremu zadostimo s kontrolo tuneliranja elektronov med kvantnimi pikami posamezne celice.

V uvodnih raziskavah je Lebar Bajec s sodelavci kot osnovni simulacijski model uporabil polkласični model. Gre za preprost simulacijski model, ki omogoča oceno funkcionalnosti QCA struktur, na žalost pa ne upošteva dovolj natančno kvantno mehanskih lastnosti celice. Le te upošteva posplošeni Hubbardov model, ki tako omogoča vključitev pristopa adiabatsnega preklapljanja. Ker dani model obravnava razporeditev gostote naboja v kvantnih pikah posamezne celice s stališča verjetnosti, smo definirali dve količini, ki služita interpretaciji pridobljenih rezultatov. To sta trojiška polarizacija in stopnja ujemanja z željenim stanjem.

S posplošenim Hubbardovim modelom, ki ni obravnaval adiabatsnega preklopa, smo nato preučili obnašanje tQCA celice. Pridobljene simulacijske rezultate pa uporabili za prireditev poteka kontrolne ure, ki se uporablja za kontrolo adiabatsnega preklopa dvojiških QCA struktur, saj se je ta izkazal za pregrobega. Kontrolna ura je ciklični signal, katerega cikel je sestavljen iz štirih enako dolgih faz. Upošteva je to dejstvo lahko poljubno QCA strukturo razdelimo na več delov oz. podsistemov, ki jih kontrolirajo največ štirje urini signali, med katerimi je četrtinski fazni zamik. Na ta način je bila uvedena sinhronizacija prenosa podatkov med tQCA celicami in omogočeno cevovodno obnašanje tQCA struktur. Sledeč temu principu smo rešili probleme osnovnih geometrij tQCA struktur, katere je predstavil v okviru svojih raziskav že Lebar Bajec. Uspešno pa smo odpravili tudi težave, na katere smo naleteli pri natančnejši obravnavi struktur s posplošenim Hubbardovim modelom.

Predstavili smo zgradbo adiabatsno kontroliranih tQCA struktur, ki realizirajo trojiško kotno ter razvejitevno linijo, trojiški negator s poljubno dolgim vhodnim oz. izhodnim delom in trojiška logična vrata, ki opravljajo operaciji konjunkcije in disjunkcije. Še več,

struktura novih logičnih vrat je po velikosti enaka dvojiškemu ekvivalentu in omogoča fleksibilno uporabo vhodov. Opisane strukture lahko služijo kot gradniki tako dvojiških kot tudi trojiških procesnih platform in nam odpirajo vrata za nadaljnjo gradnjo procesnih struktur na osnovi trojiških kvantnih celičnih avtomatov. Rezultate pričujočega dela lahko strnemo v naslednje točke:

- razširitev posplošenega Hubbardovega modela s stališča podpore simuliranja trojiških QCA struktur (poglavje 5.1);
- definicija količin za predstavitev stopnje ujemanja dejanske razporeditve naboja z željenimi razporeditvami v trojiški QCA celici (poglavje 5.2);
- preučitev obnašanja trojiške QCA celice s stališča prenosa podatkov (poglavje 5.3);
- razširitev novo vpeljanega modela z vpeljavo adiabatskega preklapljanja (poglavje 5.4);
- rešitev problema osnovne geometrije trojiške kotne in razvejitvene linije, trojiškega negatorja ter trojiških logičnih vrat, ki izvajajo operaciji konjunkcije in disjunkcije in s tem ohranjanja strukturne kompatibilnosti z obstoječimi dvojiškimi logičnimi vrati (poglavje 5.4).

Zavedamo se, da delo vsebuje veliko pojmov iz kvantne mehanike. Čeprav se računalniški inženirji običajno temu želijo izogniti, menimo, da je na tej stopnji razvoja potrebno tudi razumevanje temeljnih fizikalnih pojmov, ki spremljajo QCA procesne strukture. Le tako lahko uspešno zgradimo orodja, ki bodo omogočala zadostno mero abstrakcije in s tem osredotočanje bodočih razvijalcev le na gradnjo procesnih platform.

Problemi na katere smo naleteli v okviru magistrske naloge predstavljajo tudi izhodišča za nadaljnje delo. V prihodnosti se bomo tako posvetili nadgradnji trenutno ene najbolj obetavnih različic simulatorja QCA struktur [49] ter si s tem zgradili močno platformo za preverjanje novo nastalih tQCA struktur. Z uvedbo adiabatske kontrole prehajajo trojiški kvantni celični avtomati v področje sekvenčnih struktur, kar pomeni, da je opis njihovega obnašanja potrebno ustrezno formalizirati. Nov formalizem bi služil kot temelj za določitev nabora pravil za gradnjo kompleksnejših trojiških struktur. Predpostavljamo, da bi lahko na ta način v bližnji prihodnosti zgradili trojiško procesno enoto.

LITERATURA

- [1] W. Porod, Quantum-dot devices and quantum-dot cellular automata, *International Journal of Bifurcation and Chaos* 7 (10) (1997) 2199–2218.
- [2] S. Steane, E. G. Rieffel, Beyond bits: The future of quantum information processing, *IEEE Computer* 1 (2000) 38–45.
- [3] T. Cole, J. Lusth, Quantum-dot cellular automata, *Progress in Quantum Electronic* 25 (4) (2001) 165–189.
- [4] G. L. Snider, A. O. Orlov, I. Amlani, X. Zuo, G. H. Bernstein, C. S. Lent, J. L. Mertz, W. Porod, Quantum-dot cellular automata: Review and recent experiments, *Journal of Applied Physics* 85 (8) (1999) 4283–4285.
- [5] C. Phoenix, E. Drexler, Safe exponential manufacturing, *Nanotechnology* 15 (2004) 869–872.
- [6] R. T. Bate, G. A. Frazier, W. Frensley, J. W. Lee, M. A. Reed, Prospects for quantum integrated circuits, in: *Proceedings of SPIE Symposium on Quantum Well and Superlattice Physics*, Vol. 792, 1987, pp. 26–35.
- [7] C. Lent, P. Tougaw, W. Porod, G. Bernstein, Quantum cellular automata, *Nanotechnology* 4 (1993) 49–57.
- [8] W. H. Ware, S. N. Alexander, N. M. Astrahan, H. H. Goode, M. Rubinoff, P. Armer, L. Bers, H. D. Huskey, Soviet computer technology – 1959, *Communications of the ACM* 3 (3) (1960) 131–166.
- [9] G. Frieder, C. Luk, Ternary computers: Part 1: Motivation for ternary computers, in: *5th annual workshop on Microprogramming*, Urbana, Illinois, 1972, pp. 83–86.

- [10] W. Wang, G. Schulhof, G. A. Jullien, Quantum-dot cellular automata adders, in: 3rd IEEE Conference on Nanotechnology, Vol. 1, San Francisco, California, 2003, pp. 461–464.
- [11] K. Walus, G. A. Jullien, V. S. Dimitrov, Computer arithmetic structures for quantum cellular automata, in: Conference Record of the Thirty-Seventh Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers, Vol. 2, 2003, pp. 1435–1439.
- [12] K. Walus, A. Vetteth, G. A. Jullien, V. S. Dimitrov, RAM design using quantum-dot cellular automata, in: Nanotech 2003, Vol. 2, San Francisco, California, 2003, pp. 160–163.
- [13] K. Walus, M. G. Schulhof, G. A. Jullien, Simple 4-bit processor based on quantum-dot cellular automata (QCA), in: ASAP '05: Proceedings of the 2005 IEEE International Conference on Application-Specific Systems, Architecture Processors, IEEE Computer Society, Washington, DC, USA, 2005, pp. 288–293.
- [14] E. Dubrova, Y. Jamal, J. Mathew, Non-silicon non-binary computing: Why not?, in: 1st Workshop on Non-Silicon Computation, Boston, Massachusetts, 2002, pp. 23–29.
- [15] M. Mukaidono, The B-ternary logic and its applications to the detection of hazards in combinatorial switching circuits, in: IEEE 8th International Symposium on Multiple-Valued Logic, 1978, pp. 269–275.
- [16] D. E. Knuth, The Art of Computer Programming, 2nd Edition, Vol. 2, Addison-Wesley, Reading, 1981.
- [17] D. C. Rine (Ed.), Computer science and multiple-valued logic: Theory and applications, 2nd Edition, North-Holland, Amsterdam, 1984.
- [18] M. Mukaidono, Regular ternary logic functions – ternary logic functions suitable for treating ambiguity, IEEE Transactions on Computers C-35 (1986) 179–183.
- [19] Y. Yamamoto, M. Mukaidono, P-ternary logic functions – ternary logic functions capable of correcting input failures, in: IEEE 17th International Symposium on Multiple-Valued Logic, 1987, pp. 161–169.

- [20] Y. Yamamoto, M. Mukaidono, P-functions – ternary logic functions capable of correcting input failures and suitable for treating ambiguities, *IEEE Transactions on Computers* 41 (1) (1992) 28–35.
- [21] R. Mariani, R. Roncella, R. Saletti, P. Terreni, On the realisation of delay-insensitive asynchronous circuits with CMOS ternary logic, in: ASYNC '97 : Third International Symposium on Advanced Research in Asynchronous Circuits and Systems, Eindhoven, 1997, pp. 54–63.
- [22] B. Hayes, Third base, *American Scientist* 89 (6) (2001) 490–494.
- [23] M. Fitting, E. Orłowska (Eds.), Beyond two: Theory and applications of multiple-valued logic, Physica-Verlag, Heidelberg, 2003.
- [24] I. Lebar Bajec, M. Mraz, Towards multi-state based computing using quantum-dot cellular automata, in: C. Teucher, A. Adamatzky (Eds.), Unconventional Computing 2005: From Cellular Automata to Wetware, Luniver Press, Beckington, 2005, pp. 105–116.
- [25] I. Lebar Bajec, N. Zimic, M. Mraz, The ternary quantum-dot cell and ternary logic, *Nanotechnology* 17 (8) (2006) 1937–1942.
- [26] P. Tougaw, C. Lent, Dynamic behaviour of quantum cellular automata, *Journal of Applied Physics* 80 (8) (1996) 4722–4736.
- [27] C. Lent, P. Tougaw, A device architecture for computing with quantum dots, *Proceedings of the IEEE* 85 (4) (1997) 541–557.
- [28] S. Frost, A. Rodrigues, A. Janiszewski, R. Raush, P. Kogge, Memory in motion: A study of storage structures in QCA, in: 8th International Symposium on High Performance Computer Architecture (HPCA–8), First Workshop on Non-Silicon Computation (NSC–1), Boston, Massachusetts, 2002.
- [29] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Quantum Mechanics, Vol. 1-2, John Wiley & Sons, Paris, 2006.
- [30] S. Wolfram, A New Kind of Science, Wolfram Media, 2002.
- [31] M. Macucci (Ed.), Quantum cellular automata: Theory, experimentation and prospects, Imperial College Press, London, 2006.

- [32] C. Lent, P. Tougaw, W. Porod, Bistable saturation in coupled quantum dots for quantum cellular automata, *Applied Physics Letters* 62 (7) (1993) 714–716.
- [33] C. Lent, P. Tougaw, Lines of interacting quantum-dot cells: A binary wire, *Journal of Applied Physics* 74 (10) (1993) 6227–6233.
- [34] M. Macucci, G. Iannaccone, S. Francaviglia, B. Pellegrini, Semiclassical simulation of quantum cellular automata circuits, *International Journal of Circuit Theory and Applications* 29 (1) (2000) 37–47.
- [35] P. D. Tougaw, C. S. Lent, Logical devices implemented using quantum cellular automata, *Journal of Applied Physics* 75 (3) (1994) 1818–1825.
- [36] D. J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1994.
- [37] M. T. Niemier, P. Kogge, Logic in wire: Using quantum dots to implement a microprocessor, in: *GLS '99: Proceeding of the Ninth Great Lakes Symposium on VLSI*, IEEE Computer Society, Washington, DC, 1999, p. 118.
- [38] M. T. Niemier, M. J. Kontz, P. M. Kogge, A design of and design tools for novel quantum dot based microprocessor, in: *DAC '00: Proceedings of the 37th conference on Design automation*, ACM Press, New York, 2000, pp. 227–232.
- [39] M. T. Niemier, P. M. Kogge, Problems in designing with QCAs: Layout = timing, *International Journal of Circuit Theory and Applications* 29 (2001) 49–62.
- [40] D. M. Ivanović, *Kvantna mehanika*, Naučna knjiga, Beograd, 1974.
- [41] A. F. J. Levi, *Applied Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- [42] P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics*, Clarendon Press, Oxford, 1959.
- [43] K. Walus, T. Dysart, G. Jullien, R. Budiman, QCADesigner: A rapid design and simulation tool for quantum-dot cellular automata, *IEEE Transactions on Nanotechnology* 3 (1) (2004) 26–31.
- [44] E. Dubrova, Multiple-valued logic in VLSI: Challenges and opportunities, in: *Proceedings of NORCHIP '99*, Oslo, 1999, pp. 340–350.

- [45] I. Lebar Bajec, N. Zimic, M. Mraz, Towards the bottom-up concept: extended quantum-dot cellular automata, *Microelectronic Engineering* 83 (4-9) (2006) 1826–1829.
- [46] L. Borkowski (Ed.), Jan Lukasiewicz: Selected Works, North-Holland, Amsterdam, 1970.
- [47] D. Berzon, T. Fountain, Computer memory structures using QCA, Tech. rep., University College London (1998).
- [48] D. Berzon, T. J. Fountain, A memory design in QCA's using the SQUARES formalism, Tech. rep., University College London (1998).
- [49] S. Bhanja, S. Sarkar, Probabilistic modeling of QCA circuits using Bayesian networks, *IEEE Transactions on Nanotechnology* 5 (6) (2006) 657–670.

IZJAVA

Spodaj podpisani Primož Pečar izjavljam, da sem magistrsko nalogo izdelal samostojno pod vodstvom mentorjev prof. dr. Mihe Mraza in doc. dr. Iztoka Lebarja Bajca. Izkazano pomoč drugih sodelavcev sem v celoti navedel v zahvali.

— Primož Pečar, Ljubljana, September 2007.