

ПО ИТОГАМ ПРОЕКТОВ
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Проект РФФИ # 09-02-00050

Электронная структура двойных квантовых точек Ge в Si

А. И. Якимов¹⁾

Институт физики полупроводников им. Ржанова СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 15 мая 2012 г.

Представлен обзор теоретических исследований электронной структуры упругонапряженных двойных квантовых точек Ge в Si, проведенных в рамках шестизонного **kp**-приближения с гамильтонианом Бира–Пикуса и метода конфигурационного взаимодействия. Обнаружено существование антисвязывающего основного состояния дырок. Установлено, что при сближении квантовых точек обменная энергия двухчастичных состояний имеет минимум в точке пересечения уровней связывающего и антисвязывающего состояний, причем состояния синглета и триплета в этой точке вырождаются. Для низшего по энергии спинового синглета обнаружено явление, связанное с кулоновскими корреляциями в движении двух дырок и проявляющееся в локализации двухчастичной волновой функции в противоположных квантовых точках при удалении точек друг от друга. Показано, что степень перепутывания квантовых состояний синглета в условиях проявления таких пространственных корреляций достигает 50%.

Введение. Группы туннельно-связанных квантовых точек (КТ) рассматриваются в настоящее время в качестве элементарных блоков при строительстве архитектуры квантовых вычислений. Для реализации квантового бита информации (кубита) предлагается использовать либо спиновую [1], либо зарядовую [2–4] степени свободы, а в качестве носителей информации – электроны, дырки или экситоны. Считается, что спиновое состояние электрона наиболее предпочтительно для кодирования информации, поскольку время когерентности для спиновых состояний гораздо больше, чем для зарядовых [5, 6]. При этом оно менее чувствительно к флуктуациям электрических полей в системе. Известно, что все унитарные операции с произвольным количеством битов можно выразить в виде комбинации однобитовых квантовых манипуляций и двухбитовых операций XOR (исключающее ИЛИ) или CNOT (контролируемое НЕ) [7]. Для выполнения двухкубитовых операций необходимо осуществить “перепутывание” (*entanglement*) квантовых состояний. В работах [1, 8, 9] был сформулирован основополагающий подход, в котором роль кубита играет спин электронов на двух туннельно-связанных квантовых точках, а перепутывание спиновых состояний происходит с помощью обменного взаимодействия между соседни-

ми кубитами, описываемого гамильтонианом Гейзенберга: $H(t) = J_{ST}(t)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$. Здесь $J_{ST}(t)$ – зависящая от времени величина обменного взаимодействия, \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_2 – спиновые операторы для двух локализованных электронов. В исходном состоянии системы туннелирование между КТ подавлено и спины не взаимодействуют, образуя изолированные кубиты. В основе однокубитовых операций лежит изменение локальных спиновых состояний в каждой из точек с помощью импульсов внешнего магнитного поля. Двухкубитовая операция происходит путем понижения потенциального барьера между КТ коротким импульсом внешнего электромагнитного поля, приложенного к полевому электроду, и формирования в результате обменного взаимодействия синглетного ($S = 0$) и триплетного ($S = 1$) состояний двухэлектронной волновой функции.

Для успешной реализации двухкубитовой операции необходимо выполнение следующих требований. Во-первых, во время операции электроны должны быть локализованы в разных квантовых точках, а не в одной, иначе ошибка квантового вычисления может оказаться большой [9, 10]. Во-вторых, для осуществления высокого быстродействия время отдельной логической операции $\tau \sim h/J_{ST}$ должно быть достаточно мало, а энергетический зазор между синглетным и триплетным состояниями J_{ST} должен быть велик. При использовании современных фем-

¹⁾ e-mail: yakimov@isp.nsc.ru

тосекундных лазеров, с помощью которых предполагается управлять величиной потенциального барьера между КТ, необходимо иметь $J_{ST} > 10$ мэВ. С другой стороны, время τ должно быть достаточно велико для того, чтобы не вызывались переходы в возбужденные орбитальные состояния и не возникало спин-орбитального взаимодействия, перемешивающего синглетную и триплетную конфигурации и разрушающего спиновую ориентацию. Это означает, что энергетические зазоры между одночастичными уровнями размерного квантования в КТ должны быть больше 10 мэВ, что выполняется для размеров квантовых точек ~ 10 нм и менее. И наконец, время разрушения когерентности квантового состояния должно превышать время, требуемое для выполнения квантовых вычислительных алгоритмов.

Долгое время основным методом формирования двойных квантовых точек являлась субмикронная электронная литография гетероструктур с двумерным электронным газом в комбинации с селективным травлением и/или эффектом поля [11–15]. Недостатком таких КТ являются их большие (> 50 – 100 нм) размеры, а значит малые величины энергетических зазоров между уровнями размерного квантования и обменного взаимодействия (0.01–1 мэВ) [16]. Синтезировать массивы вертикально связанных квантовых точек малых размеров (~ 10 нм) стало возможным при использовании явлений самоорганизации полупроводниковых наноструктур в процессе гетероэпитаксиального роста материалов с большим несоответствием параметров решетки. Примерами систем, демонстрирующих эффекты самоорганизации, являются гетеропары Ge/Si и InAs/GaAs. Движущей силой образования вертикально сопряженных КТ в многослойных гетероструктурах являются упругие деформации в среде [17]. Возмущение полей напряжений от уже сформированного нанокластера (квантовой точки) проникает в тонкий зарастающий слой материала матрицы, создавая место преимущественного зарождения нового островка на следующем “этаже”. В результате формируются колонки квантовых точек, совмещенных в направлении роста. Кроме малого размера, другим достоинством искусственных молекул, образованных парами самоорганизующихся КТ, является возможность прецизионного, на атомном уровне контроля расстояния между точками в колонках, означающая возможность управления электронной связью между нанокластерами по вертикали. На рис. 1 приведен пример формирования двойных квантовых точек Ge в матрице Si [18]. Там же приведено изображение поверхности Si, на

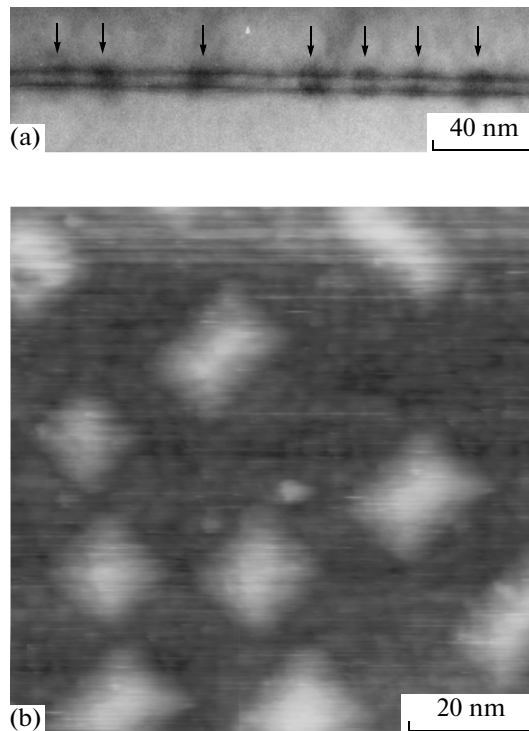


Рис. 1. (а) – Изображение поперечного среза реальной структуры с парами вертикально-сопряженных квантовых точек Ge (указаны стрелками) в Si, полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии [18]. (б) – Полученное с помощью сканирующей туннельной микроскопии изображение поверхности Si(001) с массивом самоорганизующихся нанокластеров Ge (светлые области)

которой сформирован массив нанокластеров Ge с размерами 10–20 нм.

Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками Ge, полученные в результате самоорганизации, являются одним из перспективных материалов для применения в спинтронике и квантовых вычислениях, поскольку используют в качестве базового материала кремний, а значит, способны легко интегрироваться в современную технологию СБИС. Кроме того, в таких системах времена сохранения когерентности спинового состояния могут значительно превышать времена спиновой дефазировки в гетероструктурах на основе соединений III–V [19, 20]. Так, например, характерное время перехода из триплетного состояния в синглетное составляет для двухэлектронной квантовой точки GaAs 3 мс [21], а для кремниевой ~ 100 мс [22].

Напряженные слои Ge/Si(001) представляют собой гетероструктуры 2-го типа. Существующий разрыв энергетических зон приводит к формированию

в Ge потенциальной ямы только для дырок. Задача двух дырок в квантовых точках гораздо сложнее задачи двух электронов. В отличие от зоны проводимости, валентные состояния в типичных полупроводниках строятся на основе p -образных атомных орбиталей, что приводит к сильному спин-орбитальному взаимодействию. Спин-орбитальное взаимодействие связывает орбитальный момент дырки \mathbf{L} и ее спин \mathbf{S} таким образом, что “настоящий” спин перестает быть хорошим квантовым числом, характеризующим дырочные состояния. Вместо него используют понятие псевдospина, или эффективного спина, роль которого выполняет величина полного углового момента $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Поскольку для p -образных состояний $L = 1$, J принимает значения $3/2$ или $1/2$, а его проекция на ось симметрии z – значения $\pm 3/2$ и $\pm 1/2$. Значения $J_z = 3/2$ соответствуют состоянию тяжелой дырки, а $J_z = \pm 1/2$ – состоянию легкой дырки, или дырке в спин-отщепленной подзоне. Поскольку псевдospины дырок взаимодействуют точно так же, как и “настоящие” спины электронов [23], все квантовые вычисления, разработанные для электронов, могут быть с равным успехом реализованы и в случае дырок. Кроме того, известно, что сверхтонкое взаимодействие спинов электронов с пространственно неоднородно распределенными ядерными спинами приводит к быстрой спиновой дефазировке [24]. Этому недостатка лишены дырки из-за слабой связи валентных состояний и ядерных спинов, поэтому спиновая динамика дырок может быть крайне замедленной [25]. Это обстоятельство стимулирует особый интерес к анализу дырочных состояний в квантовых точках Ge/Si.

Описание подходов. Двойная квантовая точка моделировалась двумя одинаковыми нанокластерами Ge, расположенными один над другим в направлении роста структуры [001] (ось z) в матрице Si и разделенными слоем Si толщиной d (рис. 2). Величина d в вычислительных экспериментах варьировалась от 2 до 8 нм. Нанокластеры Ge имели форму пирамид с ориентацией основания вдоль направлений [100] (ось x) и [010] (ось y) и боковыми гранями, ограниченными плоскостями {105}. Последнее обстоятельство означает, что отношение высоты h к латеральному размеру l в нанокластерах не зависит от размера и составляет ≈ 0.1 . Расчеты проводились для квантовых точек с латеральными размерами $l = 10, 15$ и 20 нм. Каждая пирамида располагалась на тонком сплошном (смачивающем) слое Ge толщиной в 4 монослоя (1.41 \AA каждый). Выбранная форма островков Ge и их размеры соответствовали реальной экспериментальной ситуации [26].

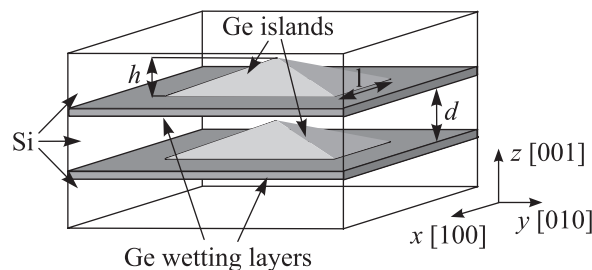


Рис. 2. Схематическое изображение двойной квантовой точки, состоящей из двух пирамидальных нанокластеров Ge, расположенных один над другим в направлении роста структуры z и разделенных слоем Si толщиной d

На первом этапе находилось трехмерное пространственное распределение упругих деформаций в среде с помощью метода конечных элементов. При этом все пространство разбивалось на конечные объемы в форме тетраэдров. Распределение механических напряжений получалось путем минимизации упругой энергии системы как функции смещений всех вершин тетраэдров. В дальнейшем полученные таким образом компоненты тензора деформаций $\varepsilon_{\alpha\beta}$ использовались в качестве входных параметров при расчетах зонной структуры. Процедура расчета энергий и одночастичных волновых функций дырок выполнялась с помощью 6-зонного $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода, в который были включены три ветви валентной зоны: подзоны тяжелых и легких дырок, а также подзона, отщепленная спин-орбитальным взаимодействием. Использовался гамильтониан Бира–Пикуса, состоящий из четырех слагаемых и имеющий вид матрицы 6×6 :

$$H = H_{vv} + H_{so} + H_{\text{strain}} + \Delta E_v, \quad (1)$$

где H_{vv} – часть гамильтониана, связанная с кинетической энергией дырки, H_{so} описывает спин-орбитальное взаимодействие, H_{strain} – деформационные поправки, $\Delta E_v = 0.54 \text{ эВ}$ отражает наличие разрыва валентной зоны на гетерогранице Ge/Si в отсутствие механических напряжений. Детальный вид всех составляющих гамильтониана для дырок в базе блоховских волновых функций приведен в работе [27]. В своих расчетах мы ограничились рассмотрением первых двух одночастичных дырочных состояний, σ_g и σ_u , составленных, соответственно, из симметричной и антисимметричной комбинаций s -подобных орбиталей, центрированных на каждой из КТ.

Для расчета двухчастичных дырочных состояний использовался метод конфигурационного взаимодей-

ствия [28]. В рамках этого подхода волновая функция системы из двух дырок записывается в виде линейной комбинации базисных функций, которые представляют собой прямые произведения одночастичных волновых функций. При этом учитываются эффекты прямого кулоновского взаимодействия между заряженными частицами, обменного взаимодействия и корреляционные эффекты, связанные со взаимодействием различных конфигураций. Многочастичный гамильтониан выглядит следующим образом:

$$H = \sum_{i\sigma} E_i \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma, \sigma'} \Gamma_{kl}^{ij} \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma'}^\dagger \psi_{k\sigma} \psi_{l\sigma}. \quad (2)$$

Здесь E_i , $\psi_i = \sigma_g$ или σ_u – одночастичные энергии дырок и соответствующие им молекулярные орбитали, σ, σ' – индексы эффективного спина,

$$\Gamma_{kl}^{ij} = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\psi_i^*(\mathbf{r}_1) \psi_j^*(\mathbf{r}_2) \psi_k(\mathbf{r}_2) \psi_l(\mathbf{r}_1)}{\epsilon(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (3)$$

где $\epsilon(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – диэлектрическая функция. Величины $V_{ij} = \Gamma_{ji}^{ij}$ и $K_{ij} = \Gamma_{ij}^{ij}$ представляют собой диагональные кулоновские и обменные интегралы соответственно. Оставшиеся интегралы описывают взаимодействие конфигураций (*scattering terms*). Для решения задачи гамильтониан (2) диагонализуется в базе детерминантов Слэтера, которые имеют в данном случае следующий вид: $|\sigma_g^\uparrow \sigma_g^\downarrow\rangle$, $|\sigma_u^\uparrow \sigma_u^\downarrow\rangle$, $|\sigma_g^\uparrow \sigma_u^\downarrow\rangle$, $|\sigma_u^\uparrow \sigma_g^\downarrow\rangle$, $|\sigma_g^\uparrow \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow \sigma_g^\downarrow\rangle$, $|\sigma_g^\uparrow \sigma_u^\downarrow\rangle + |\sigma_u^\uparrow \sigma_g^\downarrow\rangle$ (стрелки указывают направление эффективного спина).

Одночастичные молекулярные орбитали.

Из квантовой механики известно, что при сближении двух одинаковых атомов электронный уровень в каждом из них расщепляется на два. При этом основное состояние двухатомной молекулы соответствует связывающей молекулярной орбитали σ_g , а возбужденное – антисвязывающей σ_u . Аналогичная ситуация наблюдается и для искусственных аналогов молекул – двойных квантовых точек, содержащих электроны [29, 30]. Сам термин “связывающая (bonding) орбиталь” появился как следствие того, что энергия связи электрона в этом состоянии всегда больше энергии электрона в изолированных КТ.

Как показали недавние теоретические [28, 31–33] и экспериментальные [34, 35] исследования, для дырочных молекулярных орбиталей в связанных упругонапряженных КТ картина меняется существенным образом. Пример одночастичного спектра дырок, полученного для спаренных квантовых точек Ge в матрице Si в рамках 6-зонного $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода в работе [28], приведен на рис. 3. На рис. 4 показано пространственное распределение волновых функций дырок, построенных в базе молекулярных орбиталей (рис. 4а) и в

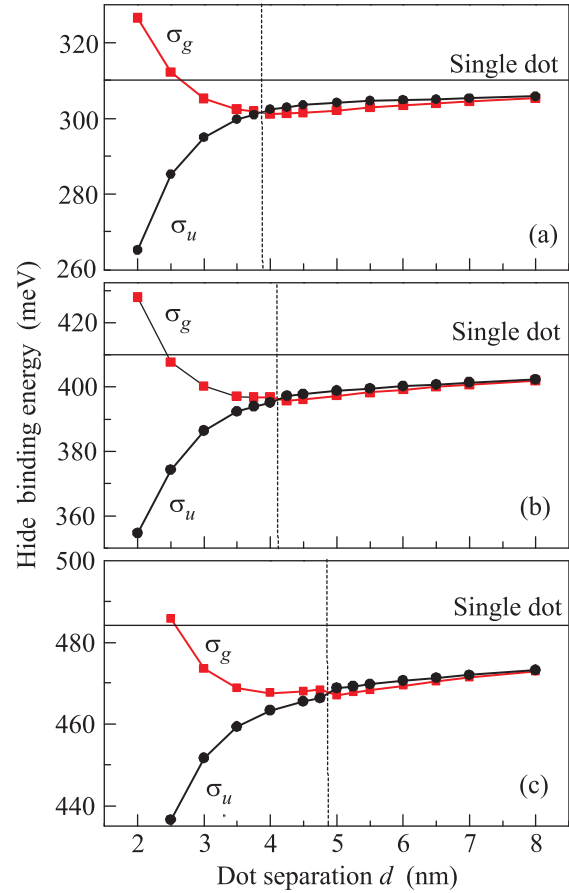


Рис. 3. Зависимости одночастичных энергий связи дырки в связывающем (σ_g) и антисвязывающем (σ_u) состояниях двойных КТ Ge/Si от расстояния между квантовыми точками, образующими искусственную молекулу, для латеральных размеров нанокластеров Ge $l = 10$ (a), 15 (b) и 20 нм (c)

базисе орбиталей ϕ_η , центрированных на отдельных квантовых точках (рис. 4b). Для получения базиса ϕ_η использовалось преобразование

$$\phi_\eta = \sum_i U_{\eta i} \psi_i, \quad (4)$$

где ψ_i – молекулярная орбиталь (σ_g или σ_u). Унитарная матрица преобразования $U_{\eta i}$ выбиралась таким образом, чтобы энергия кулоновского взаимодействия частиц на одной квантовой точке была максимальной. При малых расстояниях между КТ расщепление уровней дырки, так же как и для электронов, определяется интегралом перекрытия. Поэтому основным состоянием является симметричная орбиталь σ_g . По мере удаления КТ друг от друга интеграл перекрытия уменьшается и на первый план выступают деформационные эффекты. Доминирующий вклад в основное состояние обеспечивается подзоной

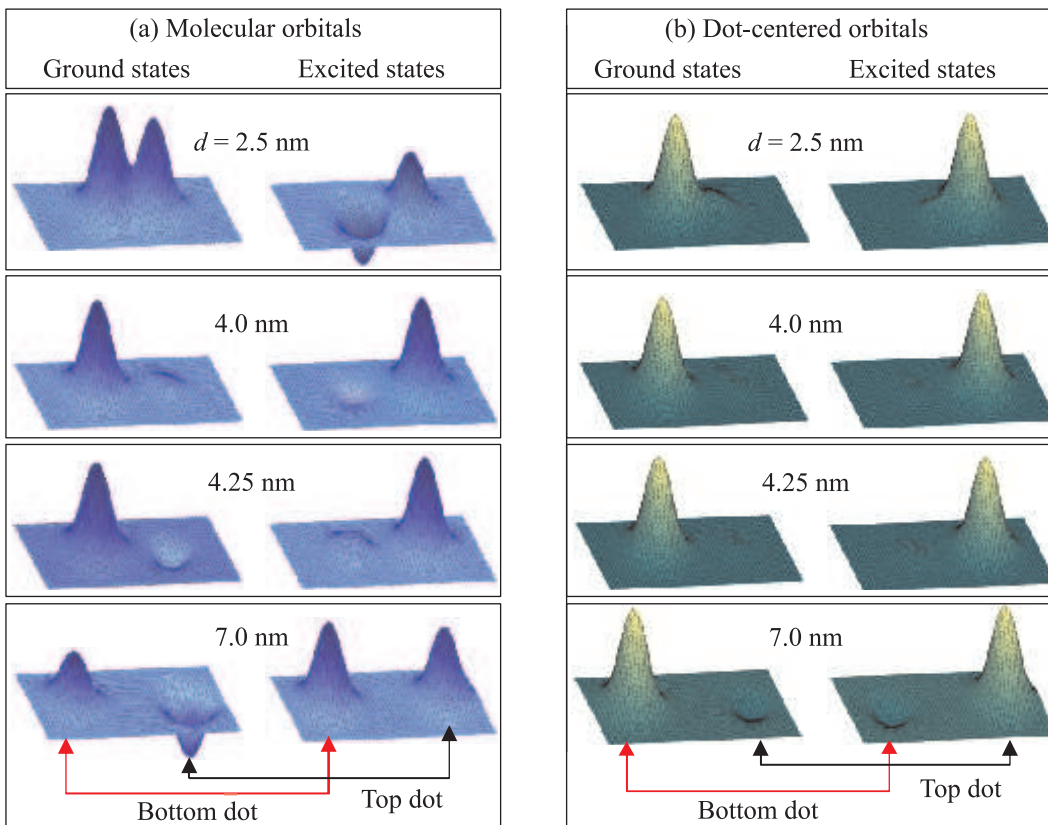


Рис. 4. Пространственное распределение волновых функций дырки для одночастичных молекулярных орбиталей (а) и для одночастичных орбиталей, локализованных на КТ (б). Волновые функции построены в плоскости yz . Ось z совпадает с вертикальной осью симметрии структуры. В качестве типичного примера приведена компонента $[3/2; -3/2]$ для размера основания КТ $l = 15$ нм. Волновые функции в базисе орбиталей, центрированных на точках, получены унитарным преобразованием базиса молекулярных орбиталей (4). Видно, что при изменении расстояния между КТ от 4 до 4.25 нм происходят смена пространственной конфигурации основного состояния и локализация дырок в разных точках

тяжелых дырок, причем этот вклад больше для орбитали σ_u [31]. Смещение края подзоны тяжелых дырок в результате деформации можно представить как [36]

$$\Delta E_{hh} = \Delta E_{hyd} + \Delta E_b, \quad (5)$$

где ΔE_{hyd} – смещение, вызванное гидростатической компонентой деформации, а ΔE_b – двусосной компонентой. Здесь

$$\Delta E_{hyd} = a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (6)$$

$$\Delta E_b = -b\varepsilon_b = -b[\varepsilon_{zz} - 0.5(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})], \quad (7)$$

где ε_{zz} , ε_{xx} и ε_{yy} – диагональные компоненты тензора напряжений, а a_v и b – соответствующие деформационные потенциалы. В Ge двусосные деформации положительны. Под действием этих деформаций подзона тяжелых дырок смещается в глубь потенциальной ямы. Поэтому при некотором расстоянии между

КТ d_c состояние σ_u оказывается глубже по энергии, чем σ_g (рис. 3), т.е. происходит смена пространственной симметрии основного состояния. В результате основным состоянием становится антисвязывающая молекулярная орбиталь. При этом вблизи d_c основное состояние целиком сосредоточено в нижней КТ, а возбужденное – в верхней (рис. 4б). Это обстоятельство является следствием асимметрии распределения деформаций в системе упругонапряженных квантовых точек [28].

Отметим еще раз, что явление формирования антисвязывающей молекулярной орбитали в основном состоянии отсутствует в природных молекулах и наблюдается только в напряженных квантовых точках p -типа. Принципиальная роль деформаций при этом продемонстрирована на рис. 5, где величина энергетического расщепления между состояниями σ_g и σ_u ($\Delta g_u = E(\sigma_g) - E(\sigma_u)$) показана как функция d для деформированных и недеформированных КТ.

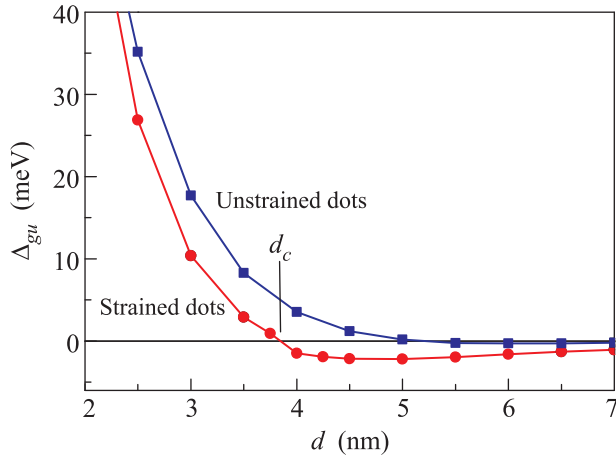


Рис. 5. Зависимость расщепления между состояниями σ_g и σ_u от расстояния между квантовыми точками для недеформированных и упруго напряженных КТ с $l = 10$ нм

Двухчастичные дырочные состояния. Нами анализировались первые четыре состояния двух дырок: псевдоспиновые синглеты $^1\Sigma_g^{(a)}$, $^1\Sigma_u$, $^1\Sigma_g^{(b)}$ и триплет $^3\Sigma_u$ [28]. На рис. 6 представлены зависимости величины Δ_{gu} для одночастичных орбиталей и расщепления синглет–триплет для двухчастичных волновых функций $J_{ST} = E(^3\Sigma_u) - E(^1\Sigma_g^{(a)})$ от расстояния между квантовыми точками и их размеров. Видно, что обменная энергия двухчастичных состояний имеет минимум в точке пересечения уровней связывающего и антисвязывающего состояний, причем состояния синглета и триплета в этой точке вырождаются. Это обстоятельство свидетельствует о том, что физическая природа наблюдаемых особенностей для одно- и двухчастичных состояний одинакова.

За исключением области $d \sim d_c$, основным состоянием двух дырок является псевдоспиновый синглет $^1\Sigma_g^{(a)}$, а первым возбужденным – трехкратно вырожденный триплет $^3\Sigma_u$ [28]. Однако характер состояния $^1\Sigma_g^{(a)}$ различен при разных d (рис. 7а). При малых расстояниях между квантовыми точками основной вклад в двухчастичную волновую функцию дает прямое произведение делокализованных молекулярных орбиталей $|\sigma_g^\uparrow\sigma_g^\downarrow\rangle$. При больших d , когда основным состоянием каждой из дырок является σ_u , синглет $^1\Sigma_g^{(a)}$ представляет собой смесь конфигураций $|\sigma_g^\uparrow\sigma_g^\downarrow\rangle$ и $|\sigma_u^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle$. При этом конфигурация $|\sigma_u^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle$ доминирует. Вблизи критической точки d_c вклады $|\sigma_g^\uparrow\sigma_g^\downarrow\rangle$ и $|\sigma_u^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle$ исчезают и волновая функция $^1\Sigma_g^{(a)}$ становится чистым состоянием $|\sigma_g^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_g^\downarrow\sigma_u^\uparrow\rangle$.

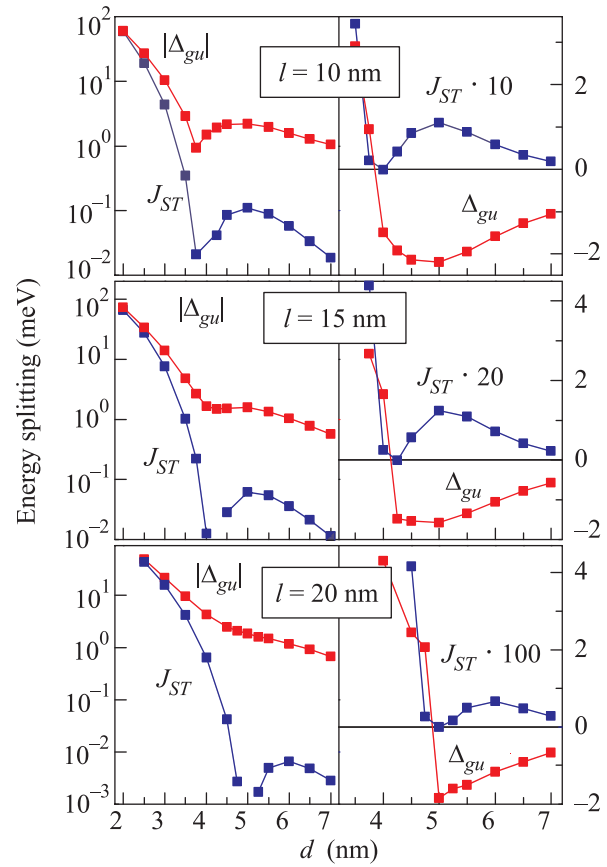


Рис. 6. Расщепление между одночастичными состояниями σ_g и σ_u ($\Delta_{gu} = E(\sigma_g) - E(\sigma_u)$) и между двухчастичными состояниями $^1\Sigma_g^{(a)}$ и $^3\Sigma_u$ ($J_{ST} = E(^3\Sigma_u) - E(^1\Sigma_g^{(a)})$) для различных размеров КТ l как функция расстояния между КТ d . На левой панели показан модуль величины Δ_{gu} . Минимумы соответствуют смене симметрии основного одночастичного состояния и вырождению двухчастичных

Энергии кулоновского взаимодействия двух дырок, находящихся на одной и той же орбитали (V_{gg} или V_{uu}), увеличиваются вблизи d_c , в то время как кулоновское и обменное взаимодействия между орбиталями (V_{gu} и K_{gu}) в этой области минимальны, причем обменный интеграл K_{gu} обращается в нуль (рис. 7б).

Для понимания физической причины подавления расщепления J_{ST} в окрестности d_c пренебрежем взаимодействием различных конфигураций. Такой подход оправдан тем, что только конфигурация $|\sigma_g^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_g^\downarrow\sigma_u^\uparrow\rangle$ вносит основной вклад в $^1\Sigma_g^{(a)}$ вблизи критической точки (рис. 7а). В рамках этого приближения двухчастичная задача имеет простое аналитическое решение [37]:

$$E(^1\Sigma_g^{(a)}) = E_g + E_u + V_{gu} + K_{gu} \quad (8)$$

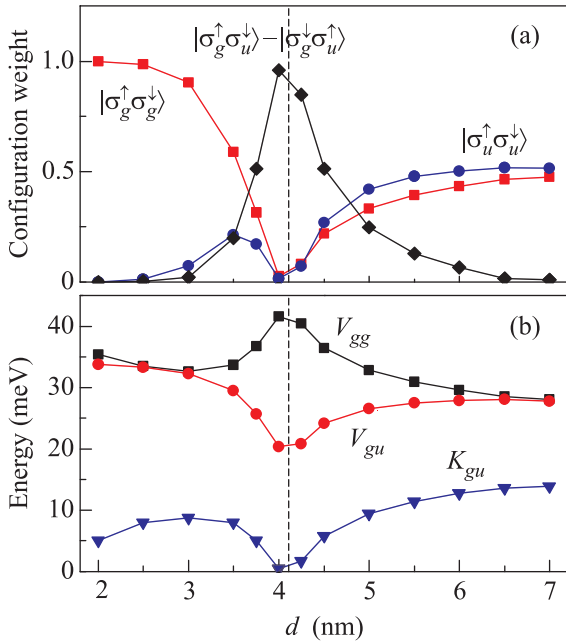


Рис. 7. (a) – Вклады различных конфигураций базисных функций в псевдоспиновый синглет ${}^1\Sigma_g^{(a)}$. (b) – Диагональные кулоновские (V_{gg} , V_{gu}) и обменный (K_{gu}) интегралы, полученные с помощью выражения (3). Величина V_{uu} равна V_{gg} , поэтому здесь не показана. Вертикальные штриховые линии соответствуют точке d_c , в которой происходит смена орбитального характера основного одночастичного состояния дырки. Данные приведены для размера основания нанокластера Ge $l = 15$ нм

для состояния синглета $|\sigma_g^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_g^\downarrow\sigma_u^\uparrow\rangle$ и

$$E({}^3\Sigma_u) = E_g + E_u + V_{gu} - K_{gu} \quad (9)$$

для состояний триплета ${}^3_+\Sigma_u$, ${}^3_-\Sigma_u$ и ${}^3_0\Sigma_u$. В этом случае выражение для расщепления синглет–триплет сводится к выражению

$$J_{ST} = E({}^1\Sigma_g^{(a)}) - E({}^3\Sigma_u) = 2K_{gu}. \quad (10)$$

Как следует из антисимметрии полной волновой функции относительно перестановки частиц, энергетический зазор между синглетом $|\sigma_g^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_g^\downarrow\sigma_u^\uparrow\rangle$ и триплетом $|\sigma_g^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle + |\sigma_g^\downarrow\sigma_u^\uparrow\rangle$ есть обменное взаимодействие. Поскольку при $d \approx d_c$ состояния σ_g и σ_u сосредоточены на разных квантовых точках (см. рис. 4), перекрестные интегралы V_{gu} и K_{gu} уменьшаются, а $J_{ST} \rightarrow 0$.

Непосредственно в точке перехода d_c молекулярные орбитали σ_g и σ_u вырождены по энергии. В этом случае двухчастичная волновая функция строится из состояний ϕ_η , что позволяет минимизировать кулоновское расталкивание дырок. Такой конструкцией

является конфигурация ${}^1\Sigma_g^{(a)} = |\phi_B^\uparrow\phi_T^\downarrow\rangle - |\phi_B^\downarrow\phi_T^\uparrow\rangle$, где ϕ_B – волновая функция дырки на нижней квантовой точке, ϕ_T – на верхней. Поскольку вблизи d_c базис молекулярных орбиталей совпадает с базисом орбиталей, центрированных на отдельных квантовых точках (рис. 4), структура синглета ${}^1\Sigma_g^{(a)}$ полностью определяется детерминантом $|\sigma_g^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_g^\downarrow\sigma_u^\uparrow\rangle$ (рис. 7a).

Для изучения пространственной симметрии двухчастичных состояний $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ мы анализировали парные корреляционные функции. Корреляционная функция определяется как $\rho(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})|^2$ и показывает, как одна частица, фиксированная в положении \mathbf{r}_0 , влияет на пространственное распределение второй частицы. Результаты, полученные методом конфигурационного взаимодействия для псевдоспинового синглета ${}^1\Sigma_g^{(a)}$, приведены на рис. 8. Стрелками показаны положения максимума плотности заряда в каждой из КТ, в которых фиксировалось положение первой дырки. При малых расстояниях между КТ вторая дырка делокализована между обеими квантовыми точками независимо от положения первой. Однако при увеличении d дырки стремятся занять противоположные квантовые точки, демонстрируя тем самым проявление пространственных корреляций. В некотором смысле это явление представляет собой аналог известного перехода Мотта в макроскопических системах, поскольку в обоих случаях причиной локализации является межэлектронное взаимодействие [38].

Двойные КТ для квантовых вычислений.

Как уже отмечалось во введении, для реализации базовых элементов квантового компьютера вероятность двойного заполнения любой из квантовых точек дырками должна быть мала. В таких условиях реализуется максимальная степень перепутывания многочастичных квантовых состояний, что должно приводить к минимальной ошибке квантового вычисления. Для неразличимых фермионов степень перепутывания D можно определить в рамках формализма энтропии Ньюмана как [37]

$$D = - \sum_i \gamma_i^2 \log_2 \gamma_i^2, \quad (11)$$

где γ_i – коэффициенты разложения многочастичной волновой функции в базисе детерминантов Слейтера. На рис. 9 показаны результаты для двойных квантовых точек Ge в Si, полученные в работе [39]. При фиксированной дистанции $d < d_c$ величина D уменьшается при увеличении размера квантовых точек l . Однако если построить степень перепутывания как функцию величины расщепления синглет–триплет J_{ST} , то все точки для любых l ложатся на

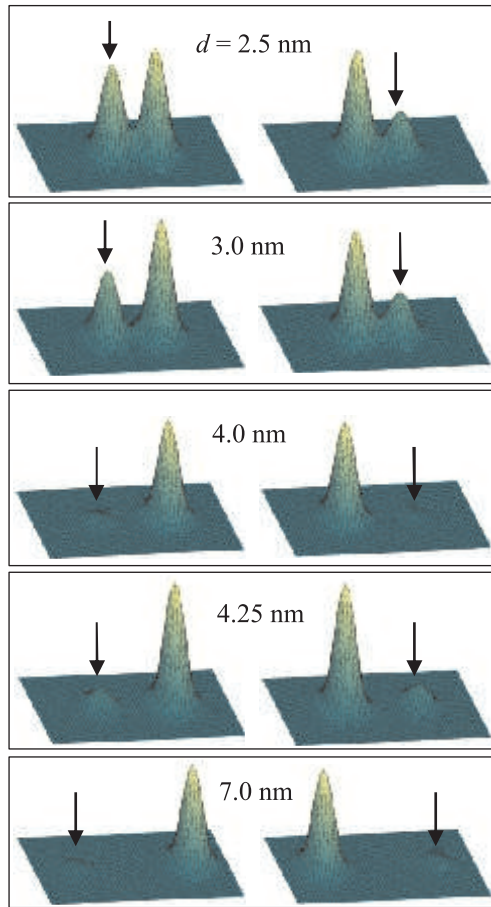


Рис. 8. Парные корреляционные функции, построенные для синглета $^1\Sigma_g^{(a)}$ в приближении взаимодействующих конфигураций для квантовых точек с латеральными размером $l = 15$ нм для нескольких расстояний между точками d . На левой панели первая дырка зафиксирована в максимуме волновой функции нижней КТ, на правой – верхней КТ (указано стрелками)

одну универсальную кривую: $D = \exp(-J_{ST}/J_0)$ с $J_0 = 6.5 \pm 0.5$ мэВ.

Для определения вероятности двойного заполнения была решена задача конфигурационного взаимодействия для двух дырок (2), но уже в базисе волновых функций, центрированных на отдельных квантовых точках (4). В качестве базиса двухчастичных состояний здесь выступают произведения $|\phi_B^\uparrow\phi_T^\downarrow\rangle$, $|\phi_B^\downarrow\phi_T^\uparrow\rangle$, $|\phi_B^\uparrow\phi_B^\downarrow\rangle$, $|\phi_T^\uparrow\phi_T^\downarrow\rangle$. Вес конфигурации $|\phi_B^\uparrow\phi_B^\downarrow\rangle$ (квадрат коэффициента разложения) дает вероятность двойного заполнения нижней квантовой точки P_{BV} . Вес детерминанта $|\phi_T^\uparrow\phi_T^\downarrow\rangle$ равен вероятности двойного заполнения верхней КТ P_{TV} . Результаты расчета полной вероятности двойного заполнения $P_{tot} = P_{BV} + P_{TV}$ представлены на рис. 10. При малых расстояниях между квантовыми точками

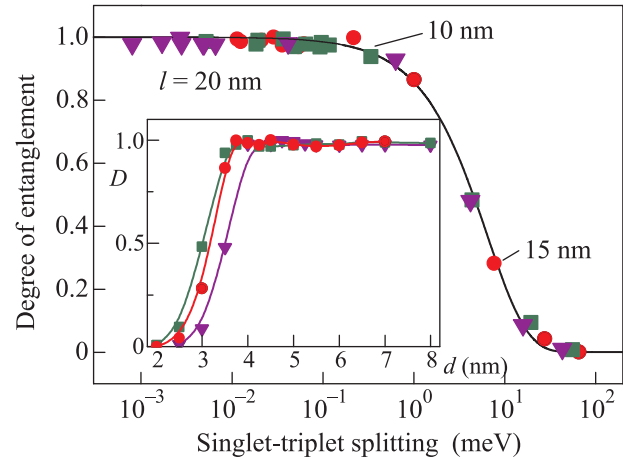


Рис. 9. Степень перепутывания для двухчастичного состояния $^1\Sigma_g^{(a)}$ как функция расщепления синглет-триплет J_{ST} . Данные приведены для трех размеров КТ: $l = 10, 15$ и 20 нм. Сплошной линией представлен результат аппроксимации данных функцией $D = \exp(-J_{ST}/J_0)$ с $J_0 = 6.5 \pm 0.5$ мэВ. Вставка: зависимость D от расстояния между квантовыми точками d

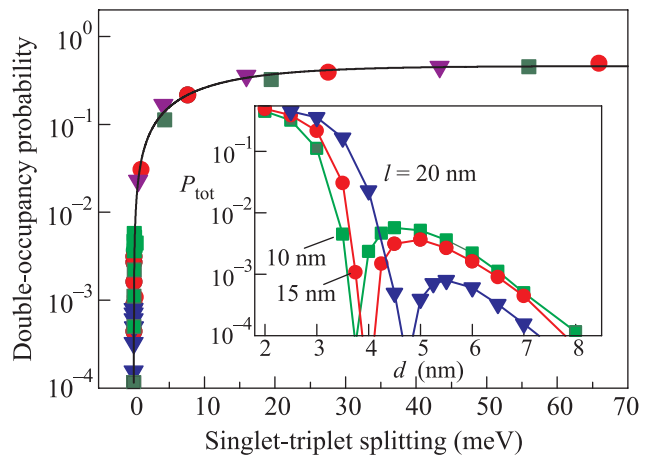


Рис. 10. Вероятность локализации двух дырок на одной квантовой точке P_{tot} для синглетного состояния $^1\Sigma_g^{(a)}$ как функция расщепления синглет-триплет J_{ST} . Данные приведены для трех размеров КТ: $l = 10, 15$ и 20 нм. Сплошной линией представлен результат аппроксимации данных функцией $P_{tot} = 0.46[1 - \exp(-J_{ST}/2J_0)]$, где $J_0 = 6.5$ мэВ. Вставка: зависимость P_{tot} от расстояния между квантовыми точками d

ми $P_{tot} \approx 0.5$, поскольку обе дырки делокализованы внутри пары КТ. В области $d \sim d_c$ синглет $^1\Sigma_g^{(a)}$ состоит в основном из конфигурации $|\sigma_g^\uparrow\sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_g^\downarrow\sigma_u^\uparrow\rangle$, причем орбитали σ_g и σ_u целиком локализуются на разных КТ. В этом случае эффекты пространственной корреляции приводят к резкому падению вероятности двойного заполнения и появлению минимума

P_{tot} в области $d = (4-5)$ нм. Интересным наблюдением явилось то, что зависимость $P_{\text{tot}}(J_{ST})$ тоже является универсальной функцией и может быть описана одним выражением: $P_{\text{tot}} = 0.46[1 - \exp(-J_{ST}/J_P)]$, с единственным параметром $J_P = 2J_0$ для квантовых точек различного размера (сплошная линия на рис. 10). Легко понять, что энергия $J_0 \approx 6$ мэВ является тем самым масштабом обменного взаимодействия дырок в системе КТ Ge/Si, при котором вероятность двойного заполнения мала (~ 0.1), а степень перепутывания квантовых состояний достаточно велика (~ 0.5).

Заключение. Целью данной работы являлось построение электронной структуры упругонапряженных двойных квантовых точек Ge/Si, совмещенных в вертикальном направлении (искусственных молекул). Слои напряженных вертикально упорядоченных КТ формируются при использовании явлений самоорганизации полупроводниковых наноструктур в процессе гетероэпитаксиального роста материалов с большим несоответствием параметров решеток. В вычислительных экспериментах спаренные квантовые точки моделировались двумя нанокластерами Ge пирамидальной формы, расположенными один над другим в направлении роста структуры и разделенными слоем Si. Латеральные размеры КТ варьировались от 10 до 20 нм, высота на порядок меньше.

Основу методов математического моделирования составляла комбинация шестизонного kp -приближения с гамильтонианом Бира-Пикуса, метода конфигурационного взаимодействия, адаптированного для многокомпонентных дырочных состояний, и формализма энтропии Ньюмана.

Установлено, что при увеличении расстояния между квантовыми точками Ge происходит пересечение энергетических уровней, соответствующих одночастичным орбиталам различной симметрии. В результате при большой дистанции между КТ Ge основным состоянием становится антисвязывающая дырочная орбиталь. Обнаружено, что при сближении квантовых точек обменная энергия двухчастичных состояний имеет минимум в точке пересечения уровней связывающего и антисвязывающего состояний, причем состояния синглета и триплета в этой точке вырождаются. Показано, что причиной смены симметрии основного одночастичного состояния и вырождения двухчастичных состояний является наличие в системе упругих деформаций. Найденны условия, обеспечивающие максимальное перепутывание детерминантов Слейтера при сохранении минимальной вероятности двойного заполнения. Для низшего по энергии спинового синглета обнаружено явление,

связанное с кулоновскими корреляциями в движении двух дырок и проявляющееся в локализации двухчастичной волновой функции в противоположных квантовых точках при удалении точек друг от друга. Показано, что степень перепутывания квантовых состояний синглета в условиях проявления таких пространственных корреляций достигает 50%.

Предсказанное в результате теоретических исследований явление формирования антисвязывающего основного состояния при увеличении длины ковалентной связи в искусственной молекуле нашло свое подтверждение в экспериментах по исследованию поглощения линейно поляризованного света в гетероструктурах Ge/SiGe/Si со спаренными КТ Ge [35].

Работа была поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований #09-02-00050. Автор обзора благодарит своих коллег – А.В. Двуреченского, А.А. Блошкина, А.В. Ненашева и А.Ф. Зиновьеву за многочисленные обсуждения работы и активное сотрудничество в ходе выполнения проекта, а также А.И. Никифорова за предоставленные изображения гетероструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge.

1. D. Loss and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
2. A. Barenco, D. Deutsch, and A. Ekert, Phys. Rev. Lett. **74**, 4083 (1995).
3. P. Zanardi and F. Rossi, Phys. Rev. Lett. **81**, 4751 (1998).
4. X.-Q. Li and Y. Arakawa, Phys. Rev. A **63**, 012302 (2000).
5. J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, Phys. Rev. Lett. **80**, 4313 (1998).
6. J. A. Gupta, D. D. Awschalom, X. Peng, and A. P. Alivisatos, Phys. Rev. B **59**, R10421 (1998).
7. A. Barenco, C. H. Bennet, R. Cleve et al., Phys. Rev. B **52**, 3457 (1995).
8. G. Burkard, D. Loss, and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. B **59**, 2070 (1999).
9. X. Hu and S. Das Sarma, Phys. Rev. A **61**, 62301 (2000).
10. J. Schliemann, D. Loss, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **63**, 085311 (2001).
11. F. R. Waugh, M. J. Berry, D. J. Mar et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 705 (1995).
12. T. Hatano, M. Stopa, and S. Tarucha, Science **309**, 268 (2005).
13. T. Schmidt, R. H. Haug, K. von Klitzing et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 1544 (1997).
14. S. Amaha, D. G. Austing, Y. Tokura et al., Solid State Commun. **119**, 183 (2001).

15. M. Pi, A. Emperador, M. Barranco et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 066801 (2001).
16. M. Friesen, P. Rugheimer, D.E. Savage et al., *Phys. Rev. B* **67**, 121301 (2003).
17. J. Tersoff, C. Teichert, and M.G. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1675 (1996).
18. А. И. Якимов, А. И. Никифоров, А. В. Двуреченский, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 549 (2007).
19. R. Vrijen, E. Yablonovitch, K. Wang et al., *Phys. Rev. A* **62**, 012306 (2005).
20. А. М. Тырышкин, S. A. Lyon, W. Jantsch, and F. Schäffler, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 126802 (2005).
21. R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 196802 (2005).
22. M. Prada, R. H. Blick, and R. Joynt, *Phys. Rev. B* **77**, 115438 (2008).
23. K. V. Kavokin, *Phys. Rev. B* **69**, 075302 (2004).
24. D. Klauser, W. A. Coish, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **73**, 205302 (2006).
25. D. Heiss, S. Schaeck, H. Huebl et al., *Phys. Rev. B* **76**, 241306(R) (2007).
26. A. I. Yakimov, A. I. Nikiforov, A. V. Dvurechenskii et al., *Nanotechnology* **17**, 4743 (2006).
27. A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, and A. V. Dvurechenskii, *Semicond. Sci. Technol.* **24**, 095002 (2009).
28. A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, and A. V. Dvurechenskii, *Phys. Rev. B* **81**, 115434 (2010).
29. M. Korkusiński and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **63**, 195311 (2001).
30. L. He, G. Bester, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **72**, 081311 (2005).
31. A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, and A. V. Dvurechenskii, *Phys. Rev. B* **78**, 165310 (2008).
32. J. I. Climente, M. Korkusinski, G. Goldoni, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **78**, 115323 (2008).
33. J. Planelles, J. I. Climente, F. Rajadell et al., *Phys. Rev. B* **82**, 155307 (2010).
34. M. F. Doty, J. I. Climente, M. Korkusinski et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 047401 (2009).
35. А. И. Якимов, В. А. Тимофеев, А. И. Никифоров, А. В. Двуреченский, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 806 (2011).
36. F. H. Pollak and M. Cardona, *Phys. Rev.* **172**, 816 (1968).
37. L. He, G. Bester, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **72**, 195307 (2005).
38. В. Ф. Гантмахер, *Электроны в неупорядоченных средах*, М.: Физматлит, 2003.
39. А. И. Якимов, А. А. Bloshkin, and A. V. Dvurechenskii, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 37 (2010).