

УДК 621.383.5

## КВАНТОВЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ МОДУЛЬ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВОЙ СТУПЕНЧАТОЙ НАНОСТРУКТУРЫ

Д.А. ПОДРЯБИНКИН, А.Л. ДАНИЛЮК, В.Е. БОРИСЕНКО

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
П. Бровки, 6, Минск, 220013, Беларусь*

*Поступила в редакцию 20 января 2009*

Предложен принцип функционирования и компоновка модуля для квантовых вычислений на основе кремниевой ступенчатой наноструктуры, содержащей цепочки магнитного изотопа кремния  $^{29}\text{Si}$  в качестве ансамблевых кубит, разделенных с помощью градиента магнитного поля. Рассчитано время поперечной релаксации ядерной поляризации цепочек ( $5,482 \cdot 10^{-4}$  с). Оценены критерии разделения резонансных частот кубит и их измеримости. Рассчитана скорость декогеренции ансамблевых кубит в зависимости от степени начальной когерентности, наличия электронного центра, количества ядер  $^{29}\text{Si}$  в ансамблевых кубитах. Установлено, что скорость декогеренции растет с уменьшением расстояния до локального центра, с увеличением количества ядер в кубитах и их степени когерентности. Показано, что для получения низких скоростей декогеренции локальные центры необходимо располагать на расстоянии порядка 10 нм. При количестве атомов в кубите больше 300 скорость декогеренции перестает зависеть от числа ядер в нем.

*Ключевые слова:* наноструктуры, магнитные изотопы кремния, градиент магнитного поля, критерий разделения резонансных частот, декогеренция.

### Введение

Магнитный изотоп кремния  $^{29}\text{Si}$  является перспективным кандидатом на использование в качестве элемента ансамблевых кубит для квантовых вычислительных структур. Так в [1] предложено располагать их на подложке из кремния  $^{28}\text{Si}$ , не содержащей магнитных изотопов, электрических затворов и примесей. В качестве кубит используются цепочки ядер магнитного изотопа  $^{29}\text{Si}$  со спином  $1/2$ , которые расположены на оборванных связях в одноатомных цепочках вдоль ступенек вицинальных граней поверхности кремния.

Технология получения таких граней на поверхности кремния предполагает ширину ступенек порядка 15 нм [2], что обуславливает необходимость разделения резонансных частот соседних ядер в цепочках с помощью градиента магнитного поля величиной порядка 1–2 Тл/мкм. Каждое ядро выполняет функцию отдельного кубита, но при этом оно имеет приблизительно  $10^5$  копий в плоскости, ортогональной оси цепочки. Запись и считывание информации на ядрах производится с помощью магниторезонансной силовой микроскопии.

Недостаток структуры, предложенной в [1], состоит в том, что для разделения кубит по резонансной частоте необходим большой градиент магнитного поля, так как кубиты располагаются на расстоянии постоянной решетки. Усложнена также организация квантовых вычислений, поскольку разделение частот производится для соседних ядер в решетке, а потом для увеличения чувствительности используются копии ядер во всех цепочках, имеющих данную резонансную частоту. В этом случае возникает необходимость синхронизации, техническое достижение которой крайне сложно. Также предполагается использование наноразмерных оптических волноводов для поляризации ядерных спинов, что существенно увеличивает трудоемкость и стоимость изготовления структуры. К тому же повышенные магнитные поля приводят к су-

ществленной деградации кремниевых метастабильных структур [3] и поэтому возникает необходимость существенно уменьшить градиент магнитного поля.

В нашей работе рассмотрено использование цепочек ядерных спинов на ступеньках поверхности кремния в качестве ансамблевых кубит. Разделение резонансных частот спинов магнитного изотопа  $^{29}\text{Si}$  производится между соседними цепочками. Поляризация ядерных спинов в цепочках осуществляется путем инжекционного возбуждения неравновесных электронов в магнитном поле (без использования оптических волноводов), которые эффективно осуществляют поляризацию ядер  $^{29}\text{Si}$  посредством триплетных центров, находящихся в неравновесном спиновом состоянии [4-7]. Целью данной работы является моделирование декогеренции, критериев разделения резонансных частот и измеримости состояний ансамблевых кубит в построенном таким образом кремниевом вычислительном кластере.

### Модель

Для организации квантовых вычислений с использованием выбранной физической системы и конструкции кремниевого вычислительного кластера необходимо оценить в первую очередь декогеренцию квантовых состояний совместно с критериями разделения резонансных частот, измеримости, возмущения резонансных частот соседними кубитами.

Для численной оценки скорости декогеренции в кластерах магнитных изотопов кремния нами предложена модель декогеренции, предполагающая что величина скорости декогеренции  $V_{dec} = 1/T_{dec}$  ( $1/ms$ ) определяется как инверсия времени затухания сигнала  $S(t)$  в  $e$  раз ( $1/e$ ) в зависимости от степени когерентности  $M$ . Для каждой зависимости сигнала затухания, взятой при определенном  $M$ , выбирается значение времени, при котором амплитуда сигнала меньше первоначальной амплитуды в  $e$  раз. Совокупность этих значений времени для различных  $M$  и есть время декогеренции  $T_{dec}$  в зависимости от степени когерентности  $M$ . Функция изменения сигнала во времени в зависимости от степени когерентности (во втором порядке по времени):

$$S_M(t) = p \exp(-\alpha M^2 t^2) + (1-p) \exp(-\alpha n t^2 / 2). \quad (1)$$

С учетом (1) выражение для общего сигнала ЯМР имеет вид

$$S(t) = p / \sqrt{n \alpha t^2 - 1} + (1-p) \exp(-\alpha n t^2 / 2),$$

где  $p = \frac{1}{n} \left( \sum_j d_{jk} \right)^2 / \sum_j d_{jk}^2$ ,  $0 < p < 1$  — геометрический параметр, характеризующий степень упорядоченности взаимного расположения ядерных магнитных диполей;  $n$  — количество ядер в цепочке;  $M$  — степень когерентности квантовых состояний для ансамбля спинов (кластера) или количество ядер в кластере, чьи состояния когерентны;  $d_{jk} = \frac{1}{2} h^2 \gamma^2 (1 - 3 \cos^2[\theta_{jk}]) / r_{jk}^3$ ,  $r_{jk}$ ,  $\theta_{jk}$  — соответственно абсолютное значение и угол между направлением оси  $z$  и вектором соединяющим спины  $j$  и  $k$ ;  $\alpha = (1/9)M_2$ ,

$$M_2 = (9/4h^2) \sum_j d_{jk}^2 \quad (2)$$

— второй момент для ансамбля идентичных взаимодействующих спинов [8].

Пределом времени декогеренции кластера является время релаксации ядерной поляризации  $T_2$ . Для спина  $1/2$  время поперечной релаксации ядерной поляризации обуславливается только спин-спиновым ядерным (дипольным) взаимодействием.

Значение  $T_2$  может быть оценено методом моментов [9]. Его величина находится из значения второго момента структурного фактора для большого ансамбля идентичных взаимодействующих спинов [10]. Величина  $T_2$  является функцией, зависящей только от структуры. Так как второй момент структурного фактора по порядку величины совпадает со значением

$\Delta v^2$ , где  $\sqrt{(\Delta v^2)} = A_{nd} \gamma / h$  — полуширина линии магнитного резонанса  $\gamma^2 = \frac{9}{16} \sum_k (1 - 3 \cos^2 \theta_{jk})^2 \frac{a^6}{r_{jk}^6}$ . Здесь, сумма по  $k$  — это сумма от выбранного ядра до остальных ядер,  $r_{jk}$  — вектор между ядром со спином  $I_j$  и другим ядром со спином  $I_k$ ;  $\theta_{jk}$  это угол между  $r_{jk}$  и направлением приложенного магнитного поля;  $a$  — расстояние между двумя соседними ядрами в цепочке. Тогда время поперечной релаксации ядерной поляризации в цепочке

$$T_2 \approx \frac{2\hbar}{A_{nd}(a)\gamma(a)}.$$

Рассмотрим систему в виде цепочки ядерных спинов и взаимодействующего с ней электрона, расположенного на некотором расстоянии от нее на парамагнитном центре.

После того как система установилась в некотором высоко коррелированном состоянии, она релаксирует в течение времени  $T_2$  под воздействием диполь-дипольных межъядерных взаимодействий и сверхтонких взаимодействий (дипольных и контактных) с электроном на локальном центре.

Усеченный гамильтониан контактного взаимодействия электрона и ядра имеет вид [8, 11]

$$H_c = \sum_n A_n I_{zn} S_z.$$

После суммирования получаем выражение для нормализованного сигнала от кластера, состоящего из определенного количества ядер и электрона. Для функции изменения сигнала во времени в зависимости от степени когерентности (во втором порядке по времени) величина (2) второй момент для ансамбля идентичных взаимодействующих спинов есть

$$M_2 = n(9/4h^2) \sum_k A_{ISk}^2. \quad (3)$$

Константа взаимодействия между электроном на локальном центре и ядром атома в цепочке определяется как [8]:

$$A_{IS} = \frac{8}{3} g_I g_S \mu_0 \mu_N \sigma \frac{1}{r_b^3} e^{-\frac{2r_{IS}}{r_b}},$$

где  $\sigma$  — степень локализации волновой функции в месте расположения ядра (для кремния  $\sigma=186$ );  $r_b$  — радиус Бора для данной примеси;  $r_{IS}$  — расстояние от ядра атома до нейтрального атома-донора, с электроном, захваченным на этот донорный атом.

В рассматриваемом случае помещаем электрон в середину цепочки на расстоянии  $c$  от ее оси. С учетом симметрии системы величина второго момента (3) будет иметь вид:

$$M_2 = \frac{n}{2} (9/4h^2) \sum_k A_{ISk}^2,$$

а величина  $d_{jk}$  для расчета значения  $p$ :

$$d_{jk} = \frac{1}{2} A_{nd}(a) (1 - 3 \cos^2 [\theta_{jk}]) / r_{jk}^3.$$

Декогеренция квантовых состояний ядерных спинов в значительной степени обусловлена релаксацией ядерной поляризации в цепочках кубит. Это учитывается при помощи эффекта сохранения поляризации ядерных спинов ансамблевого кубита — эффективное время сохранения поляризации ядерных спинов ансамблевого кубита (критерий  $\alpha$ ) и эффекта возмущения

резонансной частоты отдельного ядра соседним ядром (критерий  $\beta$ ) [8]. Эффект возмущения резонансной частоты отдельного ядра соседним ядром в данном случае не существен при условии разнесения соседних цепочек на расстояние  $b$  много большее по сравнению с постоянной решетки  $a$  (расстояние между ядрами в цепочке). Величина  $\alpha$  должна быть порядка единицы для сохранения поляризации ядерных спинов ансамблевого кубита.

В рассматриваемой структуре условие индивидуального контроля кубит по сравнению со случаем разделения частот в решетке ядер модифицируется следующим образом. Ширина линии ЯМР  $\Delta\omega$  на полувысоте пика в цепочках изотопов кремния  $^{29}\text{Si}$  должна быть больше разности резонансных частот соседних цепочек. Соответствующий критерий записывается в виде

$$\alpha = \frac{g_I \mu_N b \nabla B}{h \Delta\omega} = (1/2) \hbar T_2 g_I \mu_N b \nabla B,$$

где в данном случае ширина линии ЯМР  $\Delta\omega$  пропорциональна частоте диполь-дипольной связи  $\omega_{nd} = A_{nd}(b)/h$  соседних ядер в цепочках;  $A_{nd} = -\mu_0 g_I^2 \mu_N^2 / 4\pi r^3$  — константа диполь-дипольного взаимодействия между двумя ядрами на расстоянии  $r$ . Величина  $\alpha$  должна быть порядка единицы для сохранения поляризации ядерных спинов ансамблевого кубита.

Критерий разделения резонансных частот  $\eta$  для рассматриваемой модели имеет вид

$$\eta = \frac{\Delta\omega}{A_{nd}/\hbar} = \frac{2b^4 |I|}{\mu_N \mu_0 g_I} \frac{d|B(r)|}{dr} > 1,$$

где  $A_{nd} = -\mu_0 g_I^2 \mu_N^2 / 4\pi r^3$  — константа диполь-дипольного взаимодействия между двумя ядрами на расстоянии  $r$ , в данном случае под  $r$  принимается расстояние между ядрами в соседних цепочках изотопов кремния  $b$  ( $A_{nd}(b) = -\mu_0 g_I^2 \mu_N^2 / 4\pi b^3$ );  $\mu_0$  — магнитная постоянная;  $I$  — спин ядра;  $\mu_N$  — магнетон Бора;  $g_I$  — ядерный  $g$ -фактор ядра;  $B(r)$  — магнитное поле.

### Результаты моделирования и их обсуждение

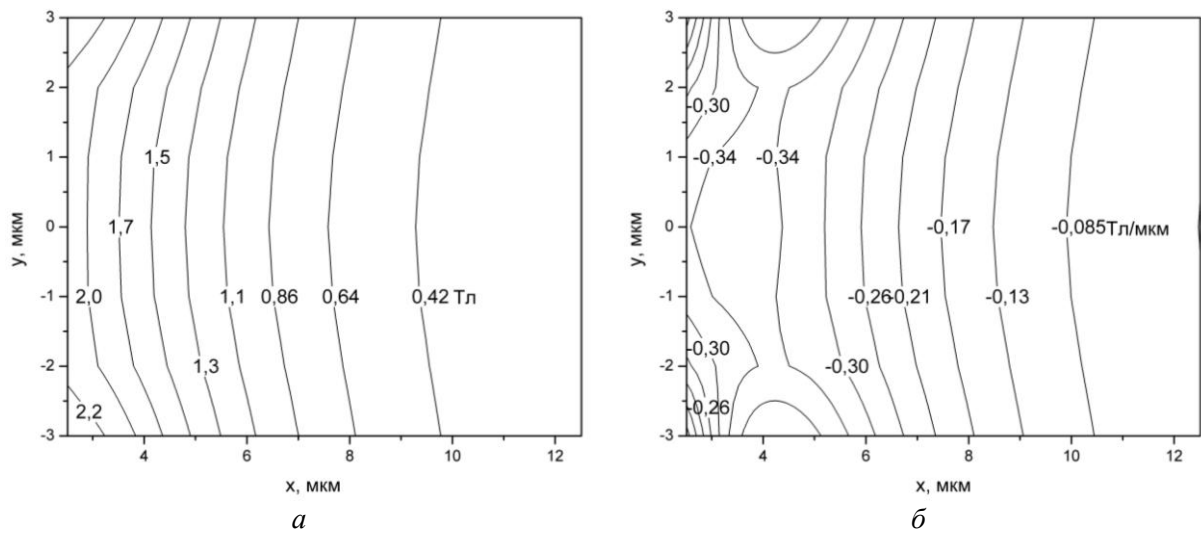
Расчет конфигурации магнитного поля показал, что эффективное разделение резонансных частот ансамблевых кубит в кремниевом вычислительном модуле достигается в области 2,51–3,5 мкм при расстоянии между кубитами 2–3 нм.

На рисунке представлены распределения магнитного поля и его градиента на расстоянии от 0 до 10 мкм при  $z=0$  от магнитной пленки. Как можно видеть из графиков, в некоторой области по оси  $x$  (от 2,5 до 4,2 мкм) имеется практически постоянный градиент магнитного поля.

Расчет магнитного поля, создаваемого пленкой магнитного материала (например, диспрозия) производили для  $W=5$  мкм,  $L=10$  мкм,  $D=10$  мкм для областей вне пределов магнитной пленки, так как выражения для магнитного поля справедливы только для внешней области. Центр находился посередине магнитной пленки, соответственно при  $x=0$ ,  $y=0$ ,  $z=0$ . Расчеты производили для области  $x=2,51$ – $12,51$  мкм,  $y$  и  $z$  от  $-3$  до  $+3$  мкм при  $J_s=10^{-3}$ – $10^{-1}$  Тл,  $b=2$ – $7$  нм,  $g_I=1,1105$ ,  $I=1/2$ ,  $a=0,234$  нм ( $J_s$  — величина намагниченности магнитной пленки).

Варьируя величиной  $J_s$ , при неизменных остальных параметрах, мы получили, что критерий разделения частот  $\eta$  выполняется на всем участке при  $J_s \geq 10^{-6}$  Тл. Это позволяет использовать магнитное поле, не приводящее к деградации кремниевых метастабильных структур.

Из результатов расчетов следует, что характерное время поперечной релаксации  $T_2$  в цепочках из изотопа кремния, разделенных с помощью градиента магнитного поля порядка  $5,482 \cdot 10^{-4}$  с, что достаточно для того, чтобы не учитывать эффект возмущения резонансной частоты отдельного ядра соседним ядром в рассматриваемых цепочках ядерных спинов магнитного изотопа кремния. В этом случае разделение резонансных частот ансамблевых кубит в кремниевом вычислительном кластере эффективно в области 2,51–3,5 мкм при расстоянии между кубитами 2–3 нм. Температура работы такого модуля лежит в пределах 78–300 К.



Распределение магнитного поля (а) и градиента магнитного поля (б) в плоскости  $x$  и  $y$  при  $z=0$  мкм в цепочке ансамблевых кубитов в виде ядерных спинов на ступеньках поверхности кремния

Размеры квантового вычислительного модуля зависят от размеров магнитной пленки ( $W=5$  мкм,  $L=10$  мкм,  $D=10$  мкм) и количества слоев с цепочками изотопа кремния. В данном случае при расчете брался один поверхностный слой. Таким образом, высота модуля обусловлена толщиной подложки и нанесенных слоев, ширина и длина ограничиваются областью размещения цепочек магнитного изотопа кремния, которая зависит от существования постоянного градиента магнитного поля на подложке ( $4 \times 4$  мкм). В целом размеры модуля получаются  $10 \times 10 \times 10$  мкм.

Мощность на одну логическую операцию (мощность лазерного луча, который разделен на отдельные лучи размером порядка  $5-6$  нм).  $W=10^{-15}-10^{-16}$  Вт/нм<sup>2</sup>.

Рассчитаны критерии разделения резонансных частот  $\eta$ , измеримости  $\alpha$  с учетом времени релаксации  $T_2$ . Расчет критериев разделения резонансных частот и сохранения поляризации ядерных спинов ансамблевого кубита показал, что в данной структуре величина  $\alpha$  составляет  $0,5-0,6$ , а критерия  $\eta=170$  при расстоянии между цепочками ядерных спинов (ансамблевыми кубитами)  $b=2-3$  нм.

Проведенное моделирование скорости декогеренции в кластерах магнитных изотопов кремния показало, что с ростом числа атомов в кластере скорость декогеренции квантовых состояний растет. С ростом степени когерентности  $M$  скорость декогеренции увеличивается и достигает насыщения. При степени когерентности, близкой к нулю, скорость декогеренции существенно уменьшается. С уменьшением расстояния от электронного центра до кластера скорость декогеренции существенно увеличивается.

В отсутствие локализованных электронов скорость декогеренции в области насыщения падает с ростом числа атомов, а в области  $M=0$  растет во всем диапазоне  $n$ . При этом скорость релаксации всегда выше скорости декогеренции при всех значениях  $n$  и  $M$ .

При наличии электронного центра скорость декогеренции с ростом числа атомов растет как в области насыщения, так и в области  $M \sim 0$  при  $10 \leq n < 200$ . В диапазоне  $200 \leq n \leq 800$  скорость декогеренции в области насыщения падает с ростом числа атомов, а в области  $M \sim 0$  растет.

Величина скорости декогеренции в отсутствие электронного центра возрастает от  $0,24$  до  $0,32$  мс<sup>-1</sup> при росте числа атомов от  $10$  до  $800$  и степени когерентности от  $1$  до  $40$ . С уменьшением расстояния от кластера до электронного центра  $r_{IS}$  скорость декогеренции резко возрастает. При  $r_{IS}=0,1$  нм ее величина составляет  $625-1525$  мс<sup>-1</sup>, при  $r_{IS}=0,5$  нм —  $250-820$  мс<sup>-1</sup>. При расстоянии  $r_{IS}=10$  нм скорость декогеренции составляет  $0,45-1,7$  мс<sup>-1</sup>.

Установлено, что скорость декогеренции выше скорости релаксации при наличии локального центра, и она снижается с ростом расстояния от кластера до центра. И только в отсут-

ствии электрона или при  $n=10$  и расстоянии до электронного центра 10 нм скорость релаксации преобладает над скоростью декогеренции.

Во всех случаях разность между скоростью декогеренции в области насыщения и в области  $M=0$  уменьшается. Так при  $n=10$  в отсутствие локального центра эта разность  $\Delta V_d$  составляет  $0,14 \text{ мс}^{-1}$ , при  $n=500$  падает до  $0,012 \text{ мс}^{-1}$ . При расстоянии до электрона 0,1 нм при  $n=10$   $\Delta V_d=375 \text{ мс}^{-1}$ , при  $n=50$   $\Delta V_d=125 \text{ мс}^{-1}$ . Все характерные частоты сведены в таблицу.

### Заключение

Цепочки ансамблевых кубит в виде ядерных спинов на ступеньках поверхности кремния, разделенных с помощью градиента магнитного поля, пригодны для построения эффективных квантовых вычислительных модулей.

Характерные частоты модуля

Параметр	Частота, кГц
Время поперечной релаксации $T_2$	1,824152
Скорость декогеренции $r_{IS}=0,1$ нм ( $n$ от 10 до 800)	625–1525
Скорость декогеренции $r_{IS}=0,5$ нм	250–820
Скорость декогеренции $r_{IS}=10$ нм	0,45–1,7
Скорость декогеренции без электронного центра	0,24–0,32

Для них следует учитывать, что при расчетах времени переключения кубитов из одного состояния в другое надо брать за верхнюю границу время декогеренции, которое не должна превышать время релаксации в зависимости от конфигурации цепочки и расстояния до локального центра. Для получения определенных значений времени переключения кластера (или времени измерения состояний кубит) необходимо ограничивать количество атомов в кластере.

## THE QUANTUM COMPUTING MODULE ON SILICON STEP NANOSTRUCTURES

D.A. PODRYABINKIN, A.L. DANILYUK, V.E. BORISENKO

### Abstract

The principle of functioning and component arrangement of the module for quantum computations on the basis of silicon nanostructures has been proposed. The module contains a chain of a magnetic isotope of  $^{29}\text{Si}$  in quality ensemble qubits separated by a magnetic field. Time of a traversal relaxation of nuclear polarization of chains ( $5,482 \cdot 10^{-4}$  c) is calculated. Resonance frequencies of the qubits and their measurability are estimated. The rate of decoherence of the qubits depending on the level of their initial coherence, presence of electronic centers, an amount of kerns  $^{29}\text{Si}$  in the ensemble have been calculated. The rate of the decoherence was found to grow with a reduction of the distance to the local centre, with magnification of an amount of kerns in the qubits and their levels of a coherence. It has been shown that low rates of the decoherence are obtained for the distance between local centers about 10 nm. The rate of the decoherence becomes independent on the number of silicon atoms in the qubit when this number exceeds 300.

### Литература

1. Goldman J.R., Ladd T.D. et al. // Appl. Phys. 2000. Vol. 71-A. P. 11.
2. Shlimak I., Safarov V.I., Vagner I.D. // J. Phys. 2001. Vol. 13-B. P. 6059.
3. Данилюк А.Л., Нарейко А.И. // Поверхность. 1996. № 9. С. 27.
4. Podryabinkin D.A., Danilyuk A.L. Physics, Chemistry and Application of Nanostructures / Ed. by V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko, V.S. Gurin // Minsk, Belarus, 24–27 May 2005. Singapore, 2005. P. 323–326.
5. Podryabinkin D.A. Physics, Chemistry and Application of Nanostructures / Proc. of the Int. Conf. Nanomeeting-2007 / Minsk, Belarus, 22–25 May 2007. Singapore, 2007. P. 36–38.
6. Подрябинкин Д.А., Данилюк А.Л., Борисенко В.Е. // Прикладная физика. 2008. № 4. С. 20–26.
7. Данилюк А.Л., Подрябинкин Д.А., Борисенко В.Е. // Электромагнитные волны и электронные системы. 2002. № 3. С. 67–72.
8. Абрагам А. Ядерный магнетизм. М., 1963.
9. Slichter C.S. Principles of Magnetic Resonance. 3<sup>rd</sup> ed. Springer, 1996.
10. Ladd T.D., Goldman J.R. et al. // Appl. Phys. 2000. Vol. A-71. P. 27.
11. Баграев Н.Т., Власенко Л.С. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 1. С. 120.