**УДК 537.9:004.94**

**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЫРОЧНЫХ КУБИТОВ В ДВУХМЕРНЫХ СЛОЯХ ГЕРМАНИЯ.**

*Образцов Кирилл Владимирович, аспирант, младший научный сотрудник1,  
 2018102293@pnu.edu.ru*

*Чибисов Андрей Николаевич, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник1,*

*Фёдоров Александр Семёнович, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник2*

*1ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск*

*2ИФ ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск*

Аннотация: c помощью программного пакета VASP были выполнены исследования электронных свойств системы Si/Ge/Si с целью возможности применения данного материала для создания квантового транзистора на его основе.

Ключевые слова: теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, кремний, германий, кубит.

**Введение**

Квантовые вычислители – это устройства, основанные на принципах квантовой механики, которые используют квантовые биты (или кубиты) для обработки информации. В отличие от классических битов в обычных компьютерах, которые могут принимать только одно из состояний (0 и 1), кубиты могут находиться в суперпозиции нескольких состояний одновременно, что позволяет квантовым компьютерам выполнять вычисления на порядки быстрее и эффективнее.Цель нашей работы состоит в проведении ряда квантово-механических расчетов системы Si/Ge/Si с внедрением в систему дырки для оценки возможности управления состоянием дырки путем воздействия внешнего магнитного поля.

**Результаты расчёта и их анализ**

Для исследования атомной и электронной структуры 2D интерфейса Si/Ge/Si прежде всего мы исследовали отдельные структуры для силицена и германена. Атомная структура 2D интерфейса Si/Ge/Si строилась следующим образом: между двумя слоями силицена размещался слой германена. Полученная в результате структура изображена на рисунке 1. Затем проводилась полная атомная релаксация структуры с однородной сеткой к-точек 9х9х1 построенной по схеме МонхорстаПэка. Расчеты проводились с помощью пакета программ VASP [1-3] Межатомные взаимодействия исследовались с применением подхода проекционных присоединенных волн (PAW) [4,5]. Расчёты учитывали спин-орбитальное неколлинеарное взаимодействие [6].

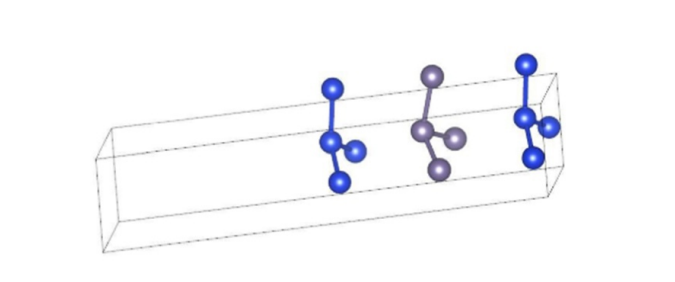
****

Рисунок 1. Интерфейс Si/Ge/Si

Для исследования электронных свойств структуры использовалась суперъячейка гораздо большего размера. Для этого ячейка Si/Ge/Si, представленная на рисунке 1, транслировалась вдоль осей X и Y с увеличением параметров ячейки a и b в 3 раза. В результате получалась суперъячейка состоящая из 54 атомов, из которых 18 атомов Ge и 36 атомов Si (рисунок 2).

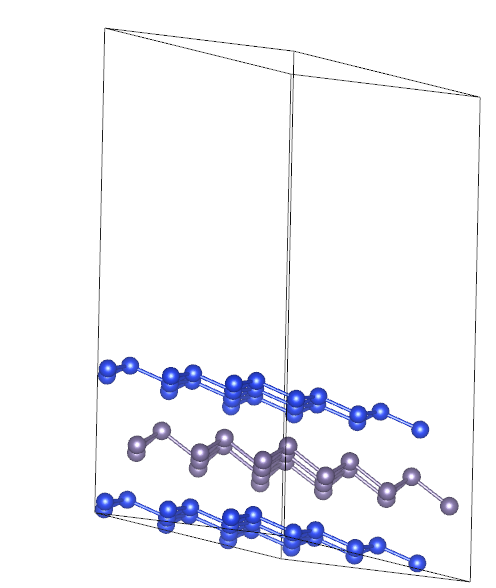
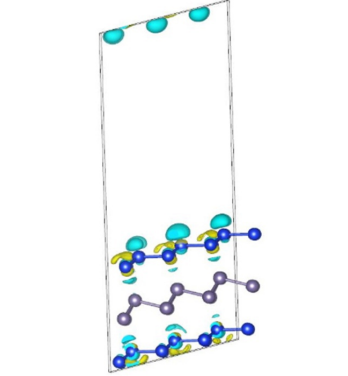
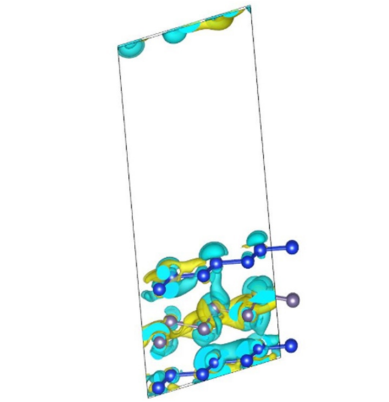
**

Рисунок 2. Суперячейка 2D-интерфейса

Затем в системе Si/Ge/Si создавался избыточный положительный заряд и задавалась начальная намагниченность. Для увеличенной элементарной ячейки применялась равномерная сетка k-точек 4x4x1 так же составленная по схеме Монхорста–Пэка. Для наглядной демонстрации локализации дырочных состояний в системе Si/Ge/Si находилась разность между зарядовыми плотностями системы без дырок и с одной дыркой.

 **

а б

Рисунок 3. Локализации дырочных состояний в системе Si/Ge/Si: (а) при заданной намагниченности +1, (б) при намагниченности -1.

Видно, что при заданной намагниченности +1 (рисунок 3а) дырочные состояния локализуется преимущественно на атомах кремния, в то время как на атомах германия состояния отсутствуют. Обратная ситуация наблюдается при намагниченности −1 (рисунок 3б). Так же, как и в прошлом случае, дырочные состояния тоже скапливается сверху атомов кремния, однако теперь они так же есть и на атомах германия.

**Выводы**

Результаты исследования показывают, что система может быть использована в качестве дырочного квантового транзистора для построения логических ворот с целью проектирования квантового вычислителя. Полученные результаты могут быть использованы для проведения последующих исследований, как экспериментальными, так и теоретическими методами.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-13-20024). Авторы выражают благодарность за предоставление доступа к кластеру Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (МСЦ РАН).

**Список использованных источников**

1. Kresse G.; Hafner, J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B, 1993. Vol. 47, pp. 558

2. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mater. Sci., 1996. Vol. 6, pp. 15–50

3. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B, 1996. Vol. 54, pp. 11169

4. Blöchl, P.E. Projector augmented-wave method. Phys. Rev. B 1994, 50, 17953

5. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B, 1999. Vol. 59, pp. 1758.

6. Hobbs D., Kresse G., Hafner J. Fully unconstrained noncollinear magnetism within the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B, 2000. Vol. 62, pp. 11556.

QUANTUM-MECHANICAL STUDY OF HOLE QUBITS IN TWO-DIMENSIONAL LAYERS OF GERMANIUM.

Obraztsov K.V., Chibisov A.N., Fedorov A.S.

Abstract: Using the VASP software package, studies were carried out on the properties of the Si/Ge/Si electronic system with the aim of using this material to create a quantum transistor based on it.

Key words: density functional theory, pseudopotential method, silicon, germanium, qubit.