

08.3

Изотопно-обогащенные Si/SiGe эпитаксиальные структуры для квантовых вычислений

© Д.В. Юрасов¹, А.В. Новиков¹, М.В. Шалеев¹, М.Н. Дроздов¹, Е.В. Демидов¹, А.В. Антонов¹, Л.В. Красильникова¹, Д.А. Шмырин¹, П.А. Юнин¹, З.Ф. Красильник¹, С.В. Ситников², Д.В. Щеглов²

¹ Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

² Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: Inquisitor@ipmras.ru

Поступило в Редакцию 24 ноября 2023 г.

В окончательной редакции 24 ноября 2023 г.

Принято к публикации 9 февраля 2024 г.

Методом молекулярно-пучковой эпитаксии получены изотопно-обогащенные гетероструктуры $^{28}\text{Si}/^{28}\text{Si}^{72}\text{Ge}$ с низким (на уровне сотен атомов на миллион) содержанием изотопов с ненулевым ядерным спином как кремния (^{29}Si), так и германия (^{73}Ge). Максимальная подвижность носителей в двумерном электронном газе в полученных структурах составила $\sim 4.5 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ при $T = 1.6 \text{ K}$, что свидетельствует об их высоком качестве. Низкое содержание изотопов Si и Ge с ненулевым ядерным спином и высокое качество полученных образцов позволяет использовать их для формирования спиновых кубитов.

Ключевые слова: SiGe-гетероструктуры, изотопное обогащение, молекулярно-пучковая эпитаксия, вторично-ионная масс-спектрометрия, спиновый кубит.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.10.57767.19813

В настоящее время для реализации квантовых вычислений рассматриваются различные физические системы и подходы к формированию квантовых битов (кубитов): сверхпроводниковые, на основе ионов в ловушках, полупроводниковые, фотонные и др. [1–3]. Многие из них сталкиваются с проблемой масштабирования из-за большого размера кубитов. Этого недостатка лишены кубиты на полупроводниковых структурах, так как их размер составляет доли микрометра [4]. Первые полупроводниковые кубиты были реализованы на гетероструктурах GaAs/AlAs [5]. Однако всем кубитам на основе полупроводников A_3B_5 присущ существенный недостаток — малое время фазовой когерентности спина из-за ненулевого ядерного спина всех изотопов атомов III и V групп таблицы Менделеева [6]. Этого недостатка лишены кубиты на основе кремния, так как среди трех изотопов Si только изотоп ^{29}Si имеет ненулевой ядерный спин. При этом технология изотопного обогащения Si и получения монокристаллов ^{28}Si с малым содержанием изотопа ^{29}Si была развита при выполнении проекта „Авогадро“ — создание эталона массы на основе ^{28}Si -сферы [7]. Еще одним существенным преимуществом кремниевых кубитов является возможность их формирования в промышленных масштабах с использованием всех достижений современной микроэлектроники [8]. Среди различных вариантов реализации кубитов на основе Si можно выделить кубиты на гетероструктурах Si/SiGe, использующие спин электрона, локализованного в так называемой „электростатической“ квантовой точке (КТ) [9,10]. Такая КТ создается системой поверхностных затворов в напряженной Si квантовой яме (КЯ),

заклученной между ненапряженными SiGe-барьерами. Одним из основных преимуществ данного типа кубита является его более низкая по сравнению с кубитами на Si МОП-структурах (МОП — металл–оксид–полупроводник) чувствительность к зарядовым шумам, основным источником которых являются зарядовые состояния в аморфных слоях подзатворных диэлектриков [4]. Использование только изотопно-обогащенного Si при формировании гетероструктур Si/SiGe обосновано тем, что электрон локализован в Si КЯ и поэтому наиболее чувствителен к присутствию атомов с ненулевым ядерным спином именно в ней. Однако гетероструктуры Si/SiGe обладают существенным недостатком с точки зрения повышения температуры работы кубитов: в них мало по сравнению с Si МОП-структурами расщепление двух нижних энергетических уровней электронов — так называемое междолинное расщепление (valley splitting, VS) [4]. В последнее время для увеличения VS предлагаются различные подходы, в том числе модификация волновой функции электрона в Si КЯ за счет вставки в нее слоев Ge и SiGe [11,12]. В связи с этим при формировании гетероструктур Si/SiGe для квантовых вычислений становится важным низкое содержание изотопов с ненулевым ядерным спином как Si, так и Ge. В настоящей работе сообщается о формировании методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) гетероструктур Si/SiGe с использованием изотопно-обогащенных источников Si и Ge и исследовании их структурных и транспортных свойств.

Для роста изотопно-обогащенных структур Si/SiGe использовалась высоковакуумная МПЭ-установка Balzers UMS 500P. Испарение Si и Ge в ней осуществ-

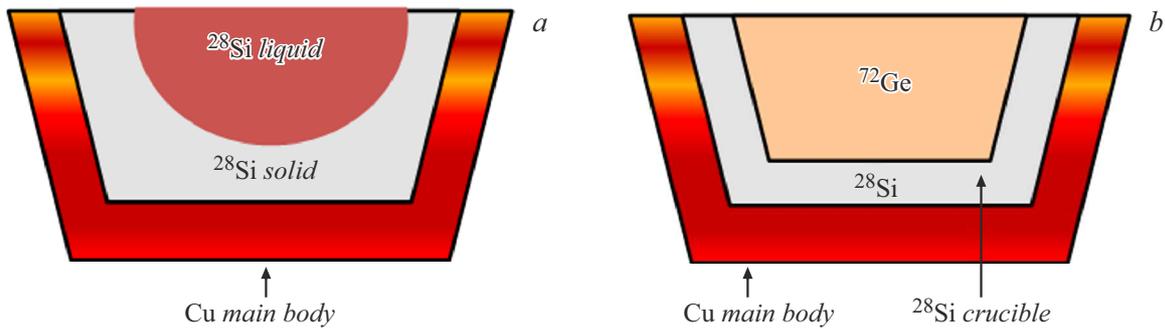


Рис. 1. *a* — схема испарения изотопно-обогащенного ^{28}Si в автотигельном режиме. *b* — схема испарения изотопно-обогащенного ^{72}Ge из кремниевого тигля, полученного за счет испарения части ^{28}Si в автотигельном режиме.

лялось из отдельных электронно-лучевых испарителей (ЭЛИ). Для испарения использовались кусочки изотопно-обогащенных монокристаллов ^{28}Si и ^{72}Ge , полученные в ИХВВ им. Г.Г. Девярых РАН (Нижний Новгород). В тигель ЭЛИ для испарения кремния были загружены кусочки изотопно-обогащенного монокристалла ^{28}Si с содержанием изотопа ^{29}Si с ненулевым ядерным спином на уровне 100 атомов на миллион (part per million, ppm). После расплавления кусочки изотопно-обогащенного Si сплавлялись в единый объем, а испарение Si происходило в так называемом „автотигельном“ режиме (рис. 1, *a*). В этом режиме испарения Si переходит в жидкое состояние только в центре тигля, а стенки тигля остаются в твердом состоянии (рис. 1, *a*). Несмотря на то что Ge имеет меньшую температуру плавления (938°C) по сравнению с Si (1414°C), его давление паров при этой температуре относительно низкое [13]. Поэтому для достижения приемлемых скоростей роста Ge приходится нагревать значительно выше температуры его плавления. В результате происходит расплавление всего Ge, загруженного в ЭЛИ, и автотигельный режим не реализуется. Контакт жидкого Ge с водоохлаждаемыми стенками тигля приводит к нестабильности испарения Ge. Ранее для решения этой проблемы было предложено использовать кремниевый тигель [14]. Данный подход использовался в настоящей работе. Для получения структур Si/SiGe с низким содержанием изотопов с ненулевым ядерным спином кремниевый тигель для испарения изотопно-обогащенного ^{72}Ge был получен из изотопно-обогащенного ^{28}Si . Для этого на первом этапе тигель ЭЛИ для испарения ^{72}Ge полностью загружался кусочками монокристалла ^{28}Si . На втором этапе после их расплавления происходило испарение заметной (до $\sim 50\%$) части ^{28}Si в автотигельном режиме, что приводило к формированию лунки. Оставшийся после испарения ^{28}Si материал и представлял собой кремниевый тигель (рис. 1, *b*). В этот тигель были загружены кусочки изотопно-обогащенного монокристалла ^{72}Ge , которые после расплавления образовывали единый объем (рис. 1, *b*). Данный материал и использовался для испарения ^{72}Ge при росте изотопно-обогащенных структур Si/SiGe.

С использованием описанной выше системы были выращены структуры Si/SiGe, дизайн которых представлен на рис. 2, *a*. Рост осуществляется на так называемых „виртуальных подложках“ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(001)$, представляющих собой градиентные релаксированные буферы $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с долей Ge в верхнем слое $x_{\text{Ge}} \sim 30\%$ (рис. 2, *a*). Релаксированные буферы были получены из природных источников. Структура, выращенная из изотопно-обогащенных источников, состояла из ненапряженного слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с $x_{\text{Ge}} = 30\%$ толщиной $h \sim 300 \text{ nm}$, Si напряженной КЯ с $h \sim 10 \text{ nm}$, покровного слоя SiGe с $x_{\text{Ge}} = 30\%$ и $h \sim 45 \text{ nm}$ и защитного слоя Si с $h \sim 2 \text{ nm}$. Температура осаждения структуры выбиралась достаточно низкой ($\sim 500^\circ\text{C}$), чтобы избежать релаксации упругих напряжений в Si КЯ, а также для получения резких гетерограниц Si/SiGe, что способствует увеличению VS [15]. Отсутствие релаксации упругих напряжений в выращенной структуре подтверждено рентгенодифракционными исследованиями.

Исследования изотопного состава в выращенной структуре были выполнены с помощью времяпролетного вторичного ионного масс-спектрометра (ВИМС) TOF.SIMS-5. Согласно данным ВИМС-анализа (с учетом калибровки по изотопам из работы [16]), содержание ^{29}Si в выращенной структуре находится на уровне 0.01% (рис. 2, *b*), соответствующем его концентрации в 100 ppm в исходном изотопно-обогащенном ^{28}Si -слитке, что близко к рекордно низким значениям, приведенным в литературе [15]. Содержание ^{73}Ge в структуре находится на уровне 0.02% (рис. 2, *b*). Полагается, что более высокое содержание ^{73}Ge в выращенной структуре, чем в испаряемом материале ($\sim 100 \text{ ppm}$ в исходном ^{72}Ge -слитке), вызвано загрязнением тигля Ge ЭЛИ небольшим количеством Ge природного обогащения, так как установка МПЭ ранее использовалась для роста SiGe-структур из источников природного обогащения. Вследствие этого небольшое количество природного материала могло попасть в тигель с изотопно-обогащенным Ge с элементов вакуумной камеры МПЭ-установки (со стенок камеры, приводов заслонок, держателей и т.п.).

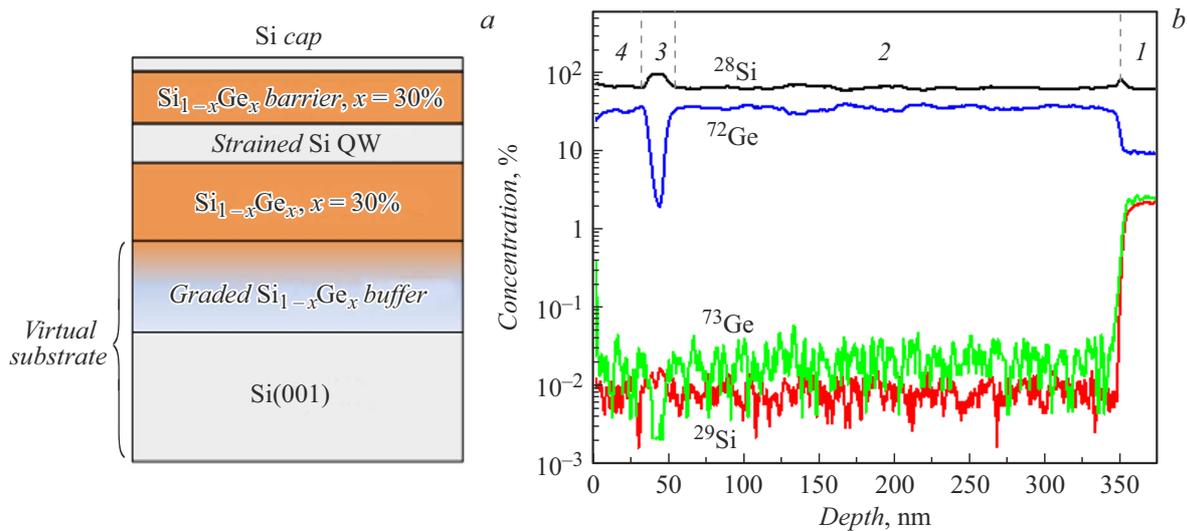


Рис. 2. *a* — схематическое представление выращенной структуры. *Virtual substrate* — используемая подложка на основе релаксированного буфера $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(001)$ ($x \sim 30\%$), полученного из природных источников. *b* — полученное с помощью ВИМС распределение различных изотопов Si и Ge в выращенной структуре Si/SiGe. Цифрами на рисунке отмечены области релаксированного SiGe-буфера, полученного из природных источников (1), ненапряженного SiGe-буфера (2), Si КЯ (3) и покровного слоя SiGe (4). Слои 2–4 выращены из изотопно-обогащенных источников.

Для характеристики транспортных свойств полученных структур Si/SiGe на них были изготовлены холловские мостики с изолированным затвором. В качестве подзатворного диэлектрика использовался слой Al_2O_3 с $h \sim 40$ nm, нанесенный методом атомно-слоевого осаждения. Измерения, выполненные при $T = 1.6$ K, показали, что проводимость появлялась при подаче на затвор положительного напряжения в несколько вольт, а при варьировании напряжения на затворе (выше порогового) в диапазоне единиц вольт слоевая концентрация электронов менялась в диапазоне от 10^{11} до $\sim 10^{12}$ cm^{-2} . Поскольку напряженная (растянутая) Si КЯ является глубокой потенциальной ямой для электронов, при низких температурах проводимость структуры вызвана транспортом двумерного электронного газа в ней. На основе измерений эффекта Холла при $T = 1.6$ K и магнитном поле 0.5 T было получено, что подвижность электронов в двумерном электронном газе в указанном выше диапазоне концентраций превышала 10^4 $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ с максимальным значением $\sim 4.5 \cdot 10^4$ $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ при концентрациях электронов $\sim (8.5-9) \cdot 10^{11}$ cm^{-2} . Полученные значения подвижности являются достаточно высокими, чтобы использовать такие структуры для формирования кубитов [15].

Таким образом, в работе методом МПЭ получены изотопно-обогащенные гетероструктуры Si/SiGe с низкой (на уровне нескольких сотен ppm) концентрацией изотопов с ненулевым ядерным спином как Si, так и Ge. Высокое качество полученных структур подтверждено измерением их транспортных свойств при низких температурах. Низкое содержание изотопов ^{29}Si и ^{73}Ge с ненулевым ядерным спином в полученных структурах и их высокое качество позволяют применять их для

формирования кубитов, использующих манипуляцию спином носителей заряда.

Финансирование работы

Работа по росту и исследованию изотопно-обогащенных SiGe-гетероструктур выполнена при поддержке Росатома в рамках Дорожной карты „Квантовые вычисления“ (договор № 868-1.3-15/15-2021 от 5.10.2021 и договор № P2194 от 14.12.2021) с использованием оборудования ЦКП „Физика и технология микро- и наноструктур“ ИФМ РАН. Работы по изготовлению холловских мостиков с изолированным затвором выполнены на оборудовании ЦКП „Наноструктуры“ ИФП СО РАН при поддержке Росатома в рамках Дорожной карты „Квантовые вычисления“ (договор № 868-1.3-15/15-2021 от 5.10.2021 и договор № P2187 от 13.12.2021).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] N.P. de Leon, K.M. Itoh, D. Kim, K.K. Mehta, T.E. Northup, H. Paik, B.S. Palmer, N. Samarth, S. Sangtawesin, D.W. Steuerman, Science, **372**, eabb282 (2021). DOI: 10.1126/science.abb2823
- [2] Y. Kim, A. Eddins, S. Anand, K.X. Wei, E. van den Berg, S. Rosenblatt, H. Nayfeh, Y. Wu, M. Zaletel, K. Temme, A. Kandala, Nature, **618**, 500 (2023). DOI: 10.1038/s41586-023-06096-3

- [3] C.D. Bruzewicz, J. Chiaverini, R. McConnell, J.M. Sage, Appl. Phys. Rev., **6**, 021314 (2019). DOI: 10.1063/1.5088164
- [4] G. Burkard, Th.D. Ladd, A. Pan, J.M. Nichol, J.R. Petta, Rev. Mod. Phys., **95**, 025003 (2023). DOI: 10.1103/RevModPhys.95.025003
- [5] J.R. Petta, A.C. Johnson, J.M. Taylor, E.A. Laird, A. Yacoby, M.D. Lukin, C.M. Marcus, M.P. Hanson, A.C. Gossard, Science, **309**, 2180 (2005). DOI: 10.1126/science.1116955
- [6] P. Stano, D. Loss, Nat. Rev. Phys., **4**, 672 (2022). DOI: 10.1038/s42254-022-00484-w
- [7] K. Fujii, H. Bettin, P. Becker, E. Massa, O. Rienitz, A. Pramann, A. Nicolaus, N. Kuramoto, I. Busch, M. Borys, Metrologia, **53**, A19 (2016). DOI: 10.1088/0026-1394/53/5/A19
- [8] A.M.J. Zwerver, T. Krähenmann, T.F. Watson, L. Lampert, H.C. George, R. Pillarisetty, S.A. Bojarski, P. Amin, S.V. Amitonov, J.M. Boter, R. Caudillo, D. Correas-Serrano, J.P. Dehollain, G. Droulers, E.M. Henry, R. Kotlyar, M. Lodari, F. Lüthi, D.J. Michalak, B.K. Mueller, S. Neyens, J. Roberts, N. Samkharadze, G. Zheng, O.K. Zietz, G. Scappucci, M. Veldhorst, L.M.K. Vandersypen, J.S. Clarke, Nat. Electron., **5**, 184 (2022). DOI: 10.1038/s41928-022-00727-9
- [9] A. Noiri, K. Takeda, T. Nakajima, T. Kobayashi, A. Sammak, G. Scappucci, S. Tarucha, Nature, **601**, 338 (2022). DOI: 10.1038/s41586-021-04182-y
- [10] X. Xue, M. Russ, N. Samkharadze, B. Undseth, A. Sammak, G. Scappucci, L.M.K. Vandersypen, Nature, **601**, 343 (2022). DOI: 10.1038/s41586-021-04273-w
- [11] T. McJunkin, B. Harpt, Y. Feng, M.P. Losert, R. Rahman, J.P. Dodson, M.A. Wolfe, D.E. Savage, M.G. Lagally, S.N. Coppersmith, M. Friesen, R. Joynt, M.A. Eriksson, Nat. Commun., **13**, 7777 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-35510-z
- [12] M. Friesen, P. Rugheimer, D.E. Savage, M.G. Lagally, D.W. van der Weide, R. Joynt, M.A. Eriksson, Phys. Rev. B, **67**, 121301(R) (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.67.121301
- [13] <https://www.mbe-komponenten.de/selection-guide/vapor-pressure.php>
- [14] В.В. Постников, А.В. Новиков, *Способ выращивания кремний-германиевых гетероструктур*, патент РФ № 2407103 (20.12.2010). <https://www.fips.ru/iiss/document.xhtml?faces-redirect=true&id=6a0ddea4abe978a8af3a9f1472e560f5>
- [15] A. Hollmann, T. Struck, V. Langrock, A. Schmidbauer, F. Schauer, T. Leonhardt, K. Sawano, H. Riemann, N.V. Abrosimov, D. Bougeard, L.R. Schreiber, Phys. Rev. Appl., **13**, 034068 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.13.034068
- [16] М.Н. Дроздов, Ю.Н. Дроздов, А.В. Новиков, П.А. Юнин, Д.В. Юрасов, ФТП, **48** (8), 1138 (2014). [M.N. Drozdov, Yu.N. Drozdov, A.V. Novikov, P.A. Yunin, D.V. Yurasov, Semiconductors, **48**, 1109 (2014). DOI: 10.1134/S1063782614080090].