Управление локализацией зарядовой и спиновой плотности в двойной квантовой точке на крае топологического изолятора как физическая основа операций с кубитами

© Е.А. Лаврухина [1], Д.В. Хомицкий [2]

[1] Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Научно-исследовательский физико-технический институт,
603022 Нижний Новгород, Россия
[2] Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского (физический факультет),
603022 Нижний Новгород, Россия

E-mail: ekaterina.a.lavrukhina@gmail.com

Поступила в Редакцию 23 июня 2025 г.
В окончательной редакции 14 августа 2025 г.
Принята к публикации 14 августа 2025 г.

Исследованы методы управления пространственной локализацией и спиновой поляризацией состояний в модели двойной квантовой точки на крае топологического изолятора на основе квантовой ямы HgTe/CdTe, сформированной тремя магнитными барьерами. Обнаружены переходы в спектре под действием резонансного электрического поля, для которых начальные и конечные состояния отвечают различной пространственной локализации либо определенному знаку выбранной спиновой проекции. На их основе показана возможность кодирования информации для моделирования связанных зарядового и спинового кубитов, а также некоторых операций с ними, в том числе однокубитных NOT, Z и двухкубитной CNOT.

Ключевые слова: топологический изолятор, магнитный барьер, двойная квантовая точка, локализация, зарядовый кубит, спиновый кубит.

DOI: 10.61011/FTP.2025.06.61570.7732

1. Введение

Топологические изоляторы (ТИ), в частности двумерные ТИ на базе квантовых ям $HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te$ [1,2], исследуются экспериментально и теоретически уже около 20 лет. За этот период получено немало фундаментальных и прикладных результатов, однако успехи в их технологическом и приборном применении более скромные. Отчасти это обусловлено уникальными свойствами краевых состояний в ТИ, являющихся устойчивыми от рассеивания на немагнитных примесях и распространяющихся на значительные, порядка нескольких микрон, расстояния вдоль края образца [2]. При этом построить компактные объекты вида квантовых точек (КТ) для последующего применения, в частности в задачах квантовых вычислений [3], оказывается значительно сложнее. Это обусловлено трудностями с созданием локализованных функций из краевых состояний в чисто электрическом поле, в то время как магнитное поле разрушает топологическую защищенность. Тем не менее теоретические модели квантовых точек с магнитными барьерами известны уже на протяжении многих лет [4–6]. В наших предшествующих работах мы развивали модели одиночной [7–9] и двойной [10] КТ с магнитными барьерами конечной проницаемости на основе диэлектрических магнитов. Было показано наличие переменного числа дискретных уровней в зависимости от высоты и ориентации намагниченности барьеров [9], а также наличие состояний непрерывного спектра над барьерами. Были исследованы возможности управления заселенностями дискретных уровней в периодическом электрическом поле [8].

В данной работе мы продолжаем исследование модели двойной квантовой точки на крае ТИ на базе квантовой ямы $HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te$, образованной тремя магнитными барьерами, которое было начато в работе [10]. Основной акцент сделан на управление пространственной локализацией и связанной с ней спиновой поляризацией состояний в зависимости от ориентации намагниченности барьеров. Показано, что изменение ориентации лишь одного центрального барьера способно влиять на локализацию и спиновую поляризацию в широких пределах. На основе предсказанных свойств нами предлагаются схемы кодирования состояний двух кубитов в рассматриваемой системе. Первый кубит можно назвать зарядовым, для кодирования используется пространственная локализация волновой функции. Второй кубит можно назвать спиновым, для кодирования используется проекция спина. Обсуждаются возможности организации в такой системе кубитов основных операций квантовых вычислений, таких как гейты NOT и Z, а также двухкубитной операции CNOT, при воздействии на систему резонансным электрическим полем.

Мы ограничиваемся решением задачи в рамках одночастичного уравнения Шредингера, не включая эффекты релаксации. Некоторые оценки таких эффектов были по-

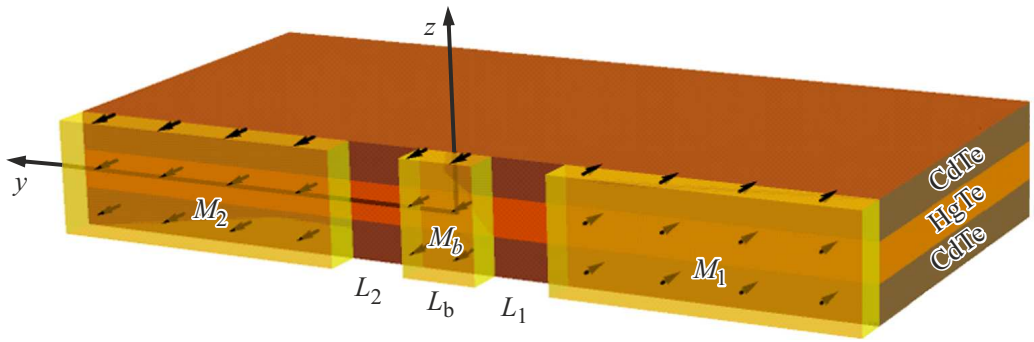

Рис. 1. Модель двойной квантовой точки, формируемой на одномерном крае ТИ магнитными барьерами, описываемая гамильтонианом (1). L_1, L_2 — ширины квантовых точек, L_b — ширина центрального барьера, M_1, M_b, M_2 — высоты барьеров в энергетических единицах.

лучены нами ранее [7], другие даны в данной работе. Они говорят о том, что при достаточно низких температурах, обычных для кубитных систем (1 K и ниже), выполнение обсуждаемых операций возможно. Кроме того, наша модель позволяет строить переключения между состояниями системы (гейты) как переходы между ее различными стационарными состояниями для фиксированных параметров системы. Полученные результаты позволяют надеяться на прикладное применение структур с двойной квантовой точкой на крае ТИ, в том числе в задачах квантовых вычислений.

2. Модель и свойства состояний

Мы используем модель двойной КТ на крае ТИ с квантовой ямой $HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te$, развитую нами в работе [10]. В этой модели рассматривается последовательность трех магнитных барьеров, расположенных на крае ТИ, между которыми формируются две области квантовых точек, как это показано на рис. 1. Гамильтониан системы имеет вид

$$\begin{aligned} H = {} & Ak_y\sigma_z - M_1 S\big(-L_1 - y\big)\big(\sigma_x\cos\theta_1 + \sigma_y\sin\theta_1\big) \\ & - M_b\big(S(y) - S(y - L_b)\big)\big(\sigma_x\cos\theta_b + \sigma_y\sin\theta_b\big) \\ & - M_2 S\big(y - L_b - L_2\big)\big(\sigma_x\cos\theta_2 + \sigma_y\sin\theta_2\big). \qquad (1) \end{aligned}$$

В (1) первое слагаемое $Ak_y\sigma_z$ отвечает кинетической энергии одномерных краевых состояний в ТИ [1], где параметр $A = 360$ мэВ · нм. Остальные слагаемые описывают энергию взаимодействия с тремя магнитными барьерами, расположенными в областях $y < -L_1$, $0 < y < L_b$ и $y > L_b + L_2$ соответственно и имеющими профиль, описываемый ступенчатой функцией $S(y)$, как это показано на рис. 1. Амплитуды взаимодействия с барьерами в энергетических единицах есть M_1, M_b, M_2, углы θ_1, θ_b, θ_2 задают ориентацию намагниченности барьеров в плоскости (xy), где $\theta = 0$ отвечает ориентации вдоль оси Ox на рис. 1. Граничные условия, волновые функции и энергетический спектр гамильтониана (1) обсуждались в работе [10]. В ней также было показано, что при взаимно противоположных ориентациях намагниченности крайних барьеров $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi$, в зависимости от ориентации намагниченности центрального барьера возникает локализация волновой функции, как это показано на рис. 2, *a* для отношения P вкладов состояний в левой и правой КТ. Здесь оранжевый цвет означает локализацию в левой КТ при $P \gg 1$, а синий цвет — в правой КТ при $P \ll 1$. Масштаб на рис. 2, *a* не позволяет показать небольшие щели, которые формируются в точках пересечения уровней при $\theta_b = \pi/2$, $3\pi/2$, т. е. в спектре присутствует антикроссинг [10].

Возникает вопрос о влиянии на электронный спектр, показанный на рис. 2, *a* и *b*, кулоновского взаимодействия между частицами, отвечающими заполненным состояниям ниже уровня Ферми, при изменении поляризации центрального барьера. Для оценки порядка энергии E_C кулоновского взаимодействия воспользуемся выражением

$$E_C \sim e^2/(\varepsilon L). \qquad (2)$$

В (2) $L \sim L_1 \sim L_2 \sim 100$ нм есть расстояние между максимумами волновой функции в спектре для состояний, ближайших друг к другу в спектре и находящихся под уровнем Ферми, которые показаны на рис. 2, *a*. По порядку величины L отвечает размеру квантовой точки $L_1(L_2)$ [10]. Постоянная $\varepsilon \sim 20$ есть низкочастотная диэлектрическая проницаемость объемного HgTe [11], которая может уменьшаться на 10–20 % в квантовой яме HgTe в зависимости от концентрации электронов [12]. После подстановки указанных параметров в (2) мы получим $E_C \sim 1$ мэВ. Характерная кинетическая энергия электронов в спектре на рис. 2 сравнима с энергией дискретных состояний и для большинства используемых в наших расчетах уровней составляет величину порядка $E_n \sim 5$–15 мэВ. Это означает, что для основной доли состояний выполняется условие $E_C/E_n \sim 0.05$–0.2, что позволяет в первом приближении не учитывать кулоновское взаимодействие с со-

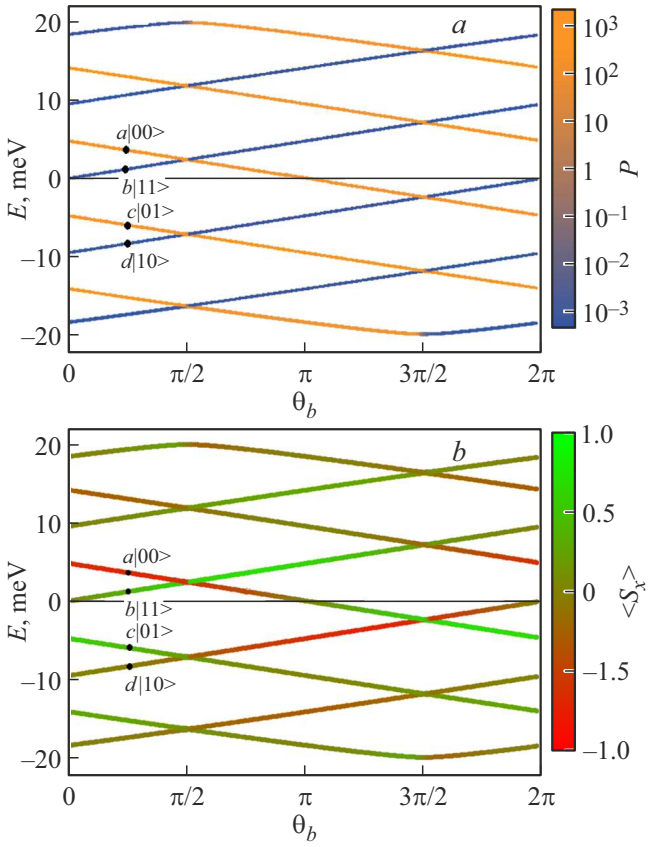

Рис. 2. a — функция локализации P в зависимости от энергии E и угла намагниченности центрального барьера θ_b для параметров в (1) $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi$, L_1, L_2 и $L_b = 100$ нм, M_1, M_2 и $M_b = 20$ мэВ. Синий цвет отвечает локализации в правой КТ при $P \ll 1$, оранжевый — локализации в левой КТ при $P \gg 1$; b — зависимость среднего значения проекции спина $\langle S_x \rangle$ от E и θ_b при тех же параметрах. На (a) и (b) пары точек a и b (или c и d) для фиксированного θ_b отвечают разной локализации и разному знаку $\langle S_x \rangle$. Рядом с точками указано кодирование состояний системы (3) из двух связанных зарядового и спинового кубитов.

стояниями, расположенными под уровнем Ферми. Для последующих приближений этот учет уже потребуется, что, однако, выходит за рамки данной работы.

3. Кодирование информации и операции с кубитами в зарядовой и спиновой подсистемах

Поведение функции P, описывающей локализацию волновой функции на рис. 2, a, говорит о возможности использовать состояния с определенными областями локализации в левой и правой КТ при фиксированной ориентации намагниченности θ_b центрального барьера в качестве базиса „зарядового“ кубита для кодирования информации. В качестве примера на рис. 2, a отмечены точки a, b, c, d, из которых точки a и c отвечают локализации состояний в левой КТ, а точки b и d — в правой КТ. Их пространственная локализация позволяет говорить о возможности кодирования состояний вида $|0\rangle$ и $|1\rangle$ для зарядового, или пространственного кубита, где состояние $|0\rangle$ приписывается значениям $P \gg 1$, т. е. на оранжевой ветви спектра, а состояние $|1\rangle$ приписывается значениям $P \ll 1$, т. е. синей ветви спектра. При таком подходе точки a и c на рис. 2, a отвечают одному и тому же, т. е. первому состоянию $|0\rangle$ зарядового кубита, а точки b и d — его второму состоянию $|1\rangle$. Переход между этими состояниями возможен, например, при подаче импульса электрического поля на резонансной частоте $\omega_{ac} = E_a - E_c$ или $\omega_{bd} = E_b - E_d$ [8], в зависимости от того, в какой из КТ локализован электрон. Отметим, что даже при точном совпадении частот ω_{ac} и ω_{bd} переходы между этими парами уровней могут быть индуцированы независимо, так как волновые функции начальных и конечных состояний в каждой паре локализованы в разных квантовых точках. Соответственно, локализация электрического поля, вызывающего переходы, в области конкретной КТ будет вызывать переходы только между одной парой уровней.

Возникает вопрос — каковы свойства спиновых проекций состояний гамильтониана (1) и можно ли также использовать их для кодирования информации. Известно, что среднее значение z-проекции спина у двухкомпонентного спинора, являющегося собственной функцией гамильтониана (1), равно нулю [9]. Остальные две проекции существенно зависят от энергии и, как мы увидим, от пространственной локализации волновой функции. На рис. 2, b показан график распределения среднего значения x-проекции спина $\langle S_x \rangle$ (в единицах $\hbar/2$) для тех же уровней энергии и тех же параметров, которым отвечает рис. 2, a. Из сопоставления рис. 2, a и b можно сделать вывод, что знак $\langle S_x \rangle$ может меняться при смене области пространственной локализации волновой функции, чему отвечает переход между оранжевой и синей ветвями на рис. 2, a. По аналогии с кодированием информации через пространственную локализацию можно повторить рассуждения для кодирования состояний второго, „спинового“ кубита в нашей системе, используя знак спиновой проекции, например, $\langle S_x \rangle$, график для которой показан на рис. 2, b. Состоянию $|0\rangle$ этого кубита можно приписать отрицательные значения проекции $\langle S_x \rangle$, показанные оттенками оранжевого цвета на рис. 2, b. Состоянию $|1\rangle$ спинового кубита, соответственно, будет отвечать положительный знак проекции $\langle S_x \rangle$, показанный оттенками зеленого цвета на рис. 2, b. Тогда точкам a и d на рис. 2, b с одинаковым знаком проекции $\langle S_x \rangle$ будет отвечать состояние $|0\rangle$, а точкам b и d, соответственно, состояние $|1\rangle$ спинового кубита.

Проведенные рассуждения для пространственной локализации на рис. 2, a и для спиновой проекции $\langle S_x \rangle$ на рис. 2, b позволяют говорить об описании двух связанных подсистем, зарядовой и спиновой, которые можно назвать зарядовым и спиновым кубитом. На этом языке точкам a, b, c, d на рис. 2, a и b можно приписать

следующие состояния двухкубитной системы, где первая позиция отвечает зарядовому, а вторая — спиновому кубиту:

$$a \to |00\rangle;\ b \to |11\rangle;\ c \to |01\rangle;\ d \to |10\rangle. \qquad (3)$$

Вначале мы обсудим возможные схемы реализации некоторых однокубитных операций с учетом кодирования (3), а затем двухкубитную операцию CNOT. Эти операции могут быть осуществлены путем подачи управляющих импульсов электрического поля, которые вызывают переходы между состояниями дискретного спектра в рассматриваемых КТ, как это обсуждалось в работе [10]. В данной работе мы обсудим только качественно принципиальную схему таких переходов.

3.1. Однокубитная операция NOT, зарядовый кубит

Эта операция может быть реализована при резонансном переходе между уровнями a и b либо c и d на рис. 2, в зависимости от положения уровня Ферми. Для обеспечения переходов вверх по энергии конечное состояние должно быть свободно, что может быть достигнуто соответствующим перемещением уровня Ферми при изменении потенциалов управляющих электродов.

3.2. Однокубитная операции NOT, спиновый кубит

Эта операция может быть реализована аналогично предыдущей, только переходы должны совершаться на резонансной частоте между парами уровней a и c либо b и d на рис. 2. Отметим, что в этот раз различие между парами уровней, между которыми совершаются переходы, кроме энергии уровней состоит также в разной пространственной локализации волновых функций, чему отвечает разный цвет линий на рис. 2, a.

3.3. Однокубитная операции Z, зарядовый и спиновый кубиты

Однокубитная операция Z состоит в умножении вектора состояния слева на матрицу Паули σ_z, переводя состояние $\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle$ в состояние $\alpha|a\rangle - \beta|b\rangle$. Как известно, ее реализация для двухуровневой системы, т. е. как для зарядового, так и для спинового кубита, может быть осуществлена просто в ходе свободной эволюции состояния [3]. Рассмотрим, например, эволюцию линейной комбинации состояний $|a\rangle$ и $|c\rangle$, образующих базис спинового кубита на рис. 2, т. е. функцию вида $\psi(t=0) = \alpha|a\rangle + \beta|c\rangle$, где α и β есть произвольные постоянные. Действительно, энергии состояний, например, в точках a и c на рис. 2, a и b отличаются знаком, т. е. $E_a = E_0$ и $E_c = -E_0$. Если выбрать момент времени, отстоящий от начала отсчета на $t_n = (\pi + 4\pi n)\hbar/2E_0$, где $n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$, то после выноса общего фазового множителя мы получим комбинацию, в которой вклад состояния $|c\rangle$ будет отличаться на фазу π от вклада состояния a, т. е. будем иметь $\psi(t = t_n) = \alpha|a\rangle - \beta|c\rangle$, что является реализацией операции Z. Аналогичные рассуждения можно провести и для линейной комбинации состояний a, d либо b, c, отвечающих базису зарядовому кубиту.

3.4. Двухкубитная операция CNOT

Как известно, операция CNOT оставляет пару двухкубитных состояний $|00\rangle$ и $|01\rangle$ неизменной, а состояния $|10\rangle$ и $|11\rangle$ меняются местами [3]. В кодировке (3) это означает, что перехода между точками a и c на рис. 2, a и b быть не должно, а между точками b и d переход реализуется. Эти пары точек отвечают, согласно рис. 2, a, различной пространственной локализации волновой функции в левой либо в правой КТ соответственно. Можно предположить, что указанный переход может быть реализован при условии, когда управляющее воздействие, например переменное электрическое поле, вызывающее переходы между состояниями с различной проекцией спина $\langle S_x \rangle$ на резонансной частоте $\omega_{bd} = E_b - E_d$, локализовано в области только правой КТ, которой отвечает пара точек b и d. Это может быть достигнуто соответствующей конфигурацией управляющих затворов. В этом случае при нахождении зарядового кубита в состоянии $|0\rangle$ с локализацией волновой функции в левой КТ переход между точками a и c не будет осуществляться, так как поле не будет воздействовать на волновую функцию. Напротив, при нахождении зарядового кубита в состоянии $|1\rangle$ с локализацией волновой функции в правой КТ будет происходить переход между точками b и d, т. е. между состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$ спинового кубита. В результате мы получим реализацию операции CNOT.

3.5. Скорость переключения спинового кубита во внешнем электрическом поле

В заключение мы оценим скорость выполнения операции CNOT для спинового кубита в периодическом электрическом поле с частотой, когда происходит переход между состояниями a и c либо b и d на рис. 2. Для операций с зарядовым кубитом можно получить аналогичные оценки. В дипольном приближении для геометрии нашей структуры на рис. 1 матричный элемент перехода есть матричный элемент оператора координаты y [8]. Отметим, что ненулевая амплитуда $|y_{mn}|$ для переходов между состояниями с близкой к противоположной проекцией спина может иметь место для гамильтониана (1). Именно первое слагаемое в (1) имеет вид вклада от сильного спин-орбитального взаимодействия (СОВ). Известно, что при наличии СОВ спинорная волновая функция для спина 1/2 имеет вид $(\psi_1(r),\ \psi_2(r))$, где компоненты 1 и 2, вообще говоря, не сводятся к одному пространственному множителю $\psi(r)$. В этом случае

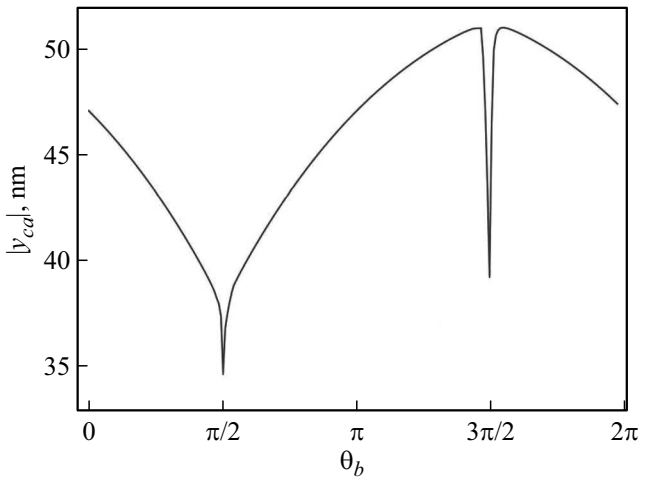

Рис. 3. Зависимость модуля $|y_{ca}|$ дипольного матричного элемента для пары состояний c и a на рис. 1 и *2* как функция угла намагниченности барьера θ_b.

матричный элемент y_{mn} может иметь ненулевое значение даже для состояний с близкой к антипараллельной ориентацией спинов. На этом основан широко используемый метод электрического дипольного спинового резонанса для манипулирования спином в полупроводниковых структурах с сильным СОВ при помощи электрического поля. Пример зависимости $|y_{mn}|$ от θ_b, полученный численным расчетом для состояний гамильтониана (1), описанных в работе [10], приведен на рис. 3, для пары состояний c и a на рис. 1 и 2, характеризующихся противоположным знаком проекции $\langle S_x \rangle$. Из рис. 3 можно сделать вывод, что для рассматриваемой пары состояний величина $|y_{ca}|$ составляет до 40–50 нм, в зависимости от угла барьера θ_b. Для такого дипольного матричного элемента характерное значение частоты Раби $\Omega = F|y_{mn}|/\hbar$ для переключений кубита в электрическом поле с напряженностью $F \sim 0.03-0.09$ мэВ/нм достигает значений $(2-10) \cdot 10^{12}\,\text{с}^{-1}$. Данная оценка говорит о том, что спиновый кубит в нашей системе способен работать в терагерцовом режиме, что является весьма перспективным для приложений в квантовых вычислениях. Детальные расчеты динамики переходов, в том числе с учетом релаксации и декогерентности, могут составлять интересную задачу для будущих исследований.

4. Заключение

Построена модель и изучены свойства локализации состояний и их спиновых проекций для двойной квантовой точки на крае топологического изолятора, образованной тремя магнитными барьерами. Показано, что различные состояния дискретного спектра отвечают как различной области пространственной локализации электрона в левой либо правой квантовой точках, так и различной избранной проекции спина. На этой основе предложена возможность кодирования информации для двух подсистем, зарядовой и спиновой, отвечающих реализации пространственного и спинового кубита. Также рассмотрены схемы некоторых однокубитных и одной двухкубитной операции, которые могут быть представлены в указанной кодировке, если осуществляются переходы между состояниями дискретного спектра в резонансном электрическом поле. Динамика данных переходов вместе с расчетом ошибок и вычислением надежности (fidelity) операций, а также построение схем других гейтов (Адамара и др.) в рамках предложенной модели могут быть темой для будущей работы.

Финансирование работы

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания FSWR-2023-0035.

Благодарности

Авторы выражают признательность Д.С. Пашину, М.В. Бастраковой, а также З.Ф. Красильнику, В.Я. Алешкину, В.И. Гавриленко и многим другим участникам XXIX Симпозиума „Нанофизика и наноэлектроника“ за ряд полезных замечаний.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] X.-L. Qi, S.-C. Zhang. Rev. Mod. Phys., **83**, 1057 (2011). DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1057
[2] З.Д. Квон, Д.А. Козлов, Е.Б. Ольшанецкий, Г.М. Гусев, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий. УФН, **190** (7), 673 (2020). DOI: 10.3367/UFNr.2019.10.038669
[3] M.A. Nielsen, I.L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, 10th Anniversary edn (N.Y., Cambridge University Press, 2010) Chap. 1.3. DOI: 10.1017/CBO9780511976667
[4] C. Timm. Phys. Rev. B, **86**, 155456 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevB.86.155456
[5] G. Dolcetto, N. Traverso Ziani, M. Biggio, F. Cavaliere, M. Sassetti. Phys. Rev. B, **87**, 235423 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevB.87.235423
[6] G.J. Ferreira, D. Loss. Phys. Rev. Lett., **111**, 106802 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.106802
[7] Д.В. Хомицкий, Е.А. Лаврухина, А.А. Чубанов, Н. Нжийа. ФТП, **51** (11), 1557 (2017). DOI: 10.21883/FTP.2017.11.45111.25
[8] Д.В. Хомицкий, К.С. Кабаев, Е.А. Лаврухина. ЖЭТФ, **158** (5), 929 (2020). DOI: 10.31857/S0044451020110152
[9] D.V. Khomitsky, A.A. Konakov, E.A. Lavrukhina. J. Phys.: Condens. Matter, **34**, 405302 (2022). DOI: 10.1088/1361-648X/ac8407

[10] Е.А. Лаврухина, Д.В. Хомицкий, А.В. Тележников. ФТП, **57** (7), 551 (2023). DOI: 10.61011/FTP.2023.07.56788.4943C
[11] A. Rogalski. Rep. Progr. Phys., **68**, 2267 (2005). DOI: 10.1088/0034-4885/68/10/R01
[12] V.Ya. Aleshkin, A.V. Germanenko, G.M. Miknov, A.A. Sherstobitov. Physica E, **128**, 114606 (2021). DOI: 10.1016/j.physe.2020.114606

Редактор А.Н. Смирнов

The control of charge and spin density localization in a double quantum dot at the edge of the topological insulator as the physical background of the qubit operations

E.A. Lavrukhina[1], *D.V. Khomitsky*[2]

[1] Physical and Technical Research Institute,
National Research State University of Nizhny Novgorod,
603022 Nizhny Novgorod, Russia
[2] Department of Physics,
National Research State University of Nizhny Novgorod,
603022 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The methods of control of the spatial localization and spin polarization are studied for the model of double quantum dot at the edge of topological insulator based on HgTe/CdTe quantum well and formed by three magnetic barriers. The transitions in the spectrum induced by the resonance electric field are found for which the initial and final states correspond to the different spatial localization or to the specific sign of the chosen spin projection. Based on these transitions, the possibility of the information encoding is demonstrated for modeling of the coupled charged and spin qubits and for some of the qubit operations including the single-qubit NOT, Z and two-qubit CNOT.