

Электронные характеристики однократно ионизированной пары доноров фосфора в кремнии и операции с зарядовыми кубитами

© А.Н. Воронько[¶]

Московский инженерно-физический институт (государственный университет),
115409 Москва, Россия

(Получена 8 октября 2007 г. Принята к печати 12 ноября 2007 г.)

Электронный энергетический спектр однократно ионизированной пары доноров фосфора P_2^+ в кремнии рассчитан численно с учетом 6-кратного вырождения зоны проводимости. Найдены огибающие волновых функций различных состояний. Полученные результаты использованы для моделирования операций с зарядовыми кубитами на основе P_2^+/Si за счет воздействия лазерных импульсов.

PACS: 73.22.-f, 71.55.-i, 03.67.Lx, 85.35.-p

1. Введение

Легирующие примеси способны кардинально менять свойства полупроводников. В частности, с помощью мелких примесей можно контролируемым путем варьировать электрическую проводимость в широком диапазоне. Для полупроводников IV группы (например, кремний и германий) такими примесями являются доноры (фосфор, мышьяк и др.) и акцепторы (бор, галлий и др.).

В последние годы повышенный интерес к различным донорам в кремнии связан с перспективой их использования в качестве носителей квантовых битов (кубитов) в системах обработки квантовой информации. Обсуждается, в частности, возможность кодирования логических состояний кубита („0“ и „1“) в состояния ядерных спинов отдельных атомов фосфора („вверх“ и „вниз“) [1–6] или зарядовые состояния электрона, локализованные на разных атомах в однократно ионизированной паре доноров P_2^+ в кремнии [7,8].

Управляемое туннелирование электрона между атомами фосфора в паре P_2^+/Si может осуществляться либо посредством медленно меняющегося электрического поля, создаваемого поверхностными электродами [9], либо с помощью резонансного лазерного импульса [10,11]. Использование резонансных импульсов, первоначально предложенное для зарядовых кубитов на основе полупроводниковых квантовых точек [12–15] и сверхпроводниковых кубитов [16], позволяет существенно сократить время операции t_{op} с кубитами P_2^+/Si , так что $t_{op} \approx 1$ пс становится намного меньше времени декогеренции $\tau \approx 1$ нс. Заметим, однако, что использованный в [10,11] теоретический подход не учитывает реальной кристаллической и электронной структуры кремния, в том числе — анизотропию эффективной массы электрона и 6-кратное вырождение дна зоны проводимости. Расчет энергетического спектра и волновых функций электрона в системе P_2^+/Si с учетом этих факторов и является предметом данной статьи. При этом помимо нижних энергетических состояний [7,8] нас будут интересовать еще и высоколежащие возбужденные состояния.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 описывается методика вычислений. Разд. 3 посвящен

расчету электронных характеристик системы P_2^+/Si . В разд. 4 представлены результаты моделирования переноса электрона между донорами под действием лазерного импульса.

2. Метод расчета

Для расчета энергетического спектра и волновых функций мелких примесей в полупроводниках чаще всего используется метод эффективной массы (МЭМ) [17–19]. Он позволяет свести решение уравнения Шредингера, описывающего поведение частицы (электрона или дырки) вблизи примеси, к решению уравнения для огибающей функции. Было предложено несколько модификаций МЭМ, основанных на разного рода приближениях и упрощениях [20–25] и не всегда приводящих к согласию с экспериментом. Численная диагонализация гамильтониана системы в базисе блоховских функций кристалла позволяет получить энергию основного состояния примеси, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными [26,27]. Однако использование такого подхода связано с большими затратами компьютерных ресурсов, поэтому его применение для расчета характеристик возбужденных уровней является проблематичным. Как показано далее, параметры системы P_2^+/Si (спектр, волновые функции, матричные элементы дипольного момента) могут быть найдены в рамках МЭМ.

В данной работе мы ограничимся рассмотрением мелких донорных примесей. Будем считать, что атом примеси помещен в один из узлов идеальной кристаллической решетки. В многодолинном приближении огибающая волновая функция электрона $F_j(\mathbf{r})$ в примесном потенциале $U(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению [28]

$$[T_j(-i\nabla) + U(\mathbf{r}) - E]\alpha_j F_j(\mathbf{r}) + \sum_{i \neq j} \alpha_i \exp(i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)\mathbf{r}) [T_i(-i\nabla) + U(\mathbf{r})] F_i(\mathbf{r}) = 0, \quad (1)$$

где $T_i(-i\nabla)$ — разложение закона дисперсии $E^0(\mathbf{k})$ вблизи i -го минимума зоны проводимости, α_i — числен-

[¶] E-mail: voronko@gmail.com

Таблица 1. Пробные функции, используемые в методе эффективной массы

Состояние	Пробная функция
1S	$F_x^{1S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_l^2 a_t}} \exp\left(-\sqrt{\frac{y^2+z^2}{a_t^2} + \frac{x^2}{a_l^2}}\right)$
2S	$F_x^{2S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_l^2 a_t}} \left(1 - \sqrt{\frac{y^2+z^2}{a_t^2} + \frac{x^2}{a_l^2}}\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{y^2+z^2}{a_t^2} + \frac{x^2}{a_l^2}}\right)$
2P ₀	$F_x^{2P_0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_l^2 a_t^3}} x \exp\left(-\sqrt{\frac{y^2+z^2}{a_t^2} + \frac{x^2}{a_l^2}}\right)$
	$F_{x,y^\pm}^{2P_\pm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_l^2 a_t}} y \exp\left(-\sqrt{\frac{y^2+z^2}{a_t^2} + \frac{x^2}{a_l^2}}\right),$
2P _±	$F_{x,z^\pm}^{2P_\pm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_l^2 a_t}} z \exp\left(-\sqrt{\frac{y^2+z^2}{a_t^2} + \frac{x^2}{a_l^2}}\right)$

ные коэффициенты, которые получаются из соображений симметрии [19] (зона проводимости в кремнии имеет шесть эквивалентных минимумов эллипсоидальной формы, которые расположены в точках \mathbf{k}_i , отстоящих от точки $\mathbf{k} = 0$ вдоль кристаллографических направлений [100] на расстояние $k_0 = 0.85k_{\max} = 0.85 \cdot 2\pi/a_{\text{Si}}$, где $a_{\text{Si}} = 0.357$ нм — период решетки кремния). Сумма в (1) описывает интерференцию функций $F_i(\mathbf{k})$, локализованных в разных минимумах зоны проводимости в обратном пространстве (valley-orbit interaction). Правильность использования этого уравнения для расчета спектров примесей замещения в кремнии исследовалась в работе [29].

В настоящей работе использован модельный потенциал $U(\mathbf{r})$ [23], который учитывает отличие примесного потенциала от кулоновского вблизи примеси и зависимость диэлектрической проницаемости кристалла от волнового вектора:

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon r} \left(1 - \exp(-r/b) + \frac{r \exp(-r/b)}{B}\right), \quad (2)$$

где параметры b и B находятся исходя из экспериментально известных значений энергий примесных состояний, $\epsilon = 11.46$ — статическая диэлектрическая проницаемость кремния [23]. При малых r этот потенциал представляет собой сферически симметричную яму глубиной $-e^2(1/b + 1/B)/\epsilon$, а при больших r является кулоновским потенциалом в кристалле с диэлектрической проницаемостью ϵ .

Решения уравнения (1) можно искать вариационным способом. При этом в качестве огибающих функций $F_i(\mathbf{r})$ берутся пробные водородоподобные функции, которые учитывают анизотропию эффективной массы (см. табл. 1). Обозначения состояний в настоящей работе взяты из [19]. Например, обозначение 2P₀ указывает, что в случае равенства продольной и поперечной эффективных масс огибающая $F_i^{2P_0}(\mathbf{r})$ становится водородоподобной волновой функцией, соответствующей

2P орбитали с магнитным квантовым числом $m = 0$ в направлении \mathbf{k}_i . Вариационные параметры a_l и a_t определяются путем минимизации энергии состояния с данной волновой функцией и имеют смысл продольного и поперечного эффективных боровских радиусов.

Выражение для энергии связанного состояния имеет вид

$$E(\Gamma) = \frac{\sum_i \sum_j \alpha(\Gamma)_i^* \alpha(\Gamma)_j [T_{ij} + U_{ij}]}{\sum_i \sum_j \alpha(\Gamma)_i^* \alpha(\Gamma)_j N_{ij}}, \quad (3)$$

где Γ — симметрия состояния, индексы пробегают ряд значений $x, -x, y, -y, z, -z$, а матричные элементы T_{ij} , U_{ij} , N_{ij} выражаются через функции $F_i(\mathbf{r})$:

$$T_{ij} = \int F_j(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)\mathbf{r}) T(-i\nabla) F_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$U_{ij} = \int F_j(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) F_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4)$$

$$N_{ij} = \int F_j(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)\mathbf{r}) F_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Учитывая симметрию функций $F_i(\mathbf{r})$, в суммах по i, j выражения (3) можно выделить слагаемые с $i = j$, слагаемые с (i, j) , образующими пары $(x, -x)$, $(y, -y)$, $(z, -z)$ и остальные слагаемые. В знаменателе (3) слагаемые с $i \neq j$ пренебрежимо малы, и выражение для энергии в итоге запишется как

$$E(\Gamma) = E_1 + E_2 \sum_{i,j=-i} \alpha(\Gamma)_j^* \alpha(\Gamma)_i + E_3 \sum_i \sum_j \alpha(\Gamma)_j^* \alpha(\Gamma)_i, \quad (5)$$

где $E_1 = T_{i,i} + U_{i,i}$, $E_2 = T_{i,-i} + U_{i,-i}$, $E_3 = T_{i,j} + U_{i,j}$ ($j \neq i, j \neq -i$).

Таблица 2. Энергии и параметры волновых функций нескольких нижних уровней примесного атома фосфора в кремнии. E_c — дно зоны проводимости

Уровень	Наши результаты			Данные работы [23]	Данные работы [20]	Экспериментальные данные [30,31]
	$a_1, \text{Å}$	$a_2, \text{Å}$	$E - E_c, \text{мэВ}$	$E - E_c, \text{мэВ}$	$E - E_c, \text{мэВ}$	$E - E_c, \text{мэВ}$
1S(A_1)	8.20	14.82	-45.4724	-45.469		-45.47
1S(T_1)	11.62	21.07	-33.7408	-33.740	-31.27	-33.74
1S(E)	12.92	22.15	-32.2610	-32.376		-32.37
2P ₀ (A_1)	21.83	36.11	-11.3554			
2P ₀ (T_1)	21.83	36.11	-11.3522	-11.352	-11.51	-11.39
2P ₀ (E)	21.83	36.11	-11.3517			
2S(A_1)	22.54	40.72	-8.9682	-8.947		
2S(T_1)	25.47	45.12	-8.0422	-8.042	-8.83	-
2S(E)	26.61	46.05	-7.8838	-7.895		
2P _± (T_1)	32.77	53.65	-6.3278			
2P _± (T_2)	32.85	55.09	-6.3277	-6.326	-6.40	-6.33

Для поиска параметров b и B модельного потенциала (2) строится кривая $B(b)$, отвечающая экспериментальному значению энергии состояния 1S(A_1); аналогичным образом строится кривая, отвечающая энергии состояния 1S(T_1); точка пересечения этих кривых определяет искомые значения параметров b и B . Мы получили $b = 0.587 \text{ Å}$, $B = 0.071 \text{ Å}$, что несколько отличается от значений $b = 0.608 \text{ Å}$, $B = 0.072 \text{ Å}$, найденных в работе [23] с использованием приближения сферически симметричной зоны проводимости.

Полученные с помощью выражений (4) и (5) энергии нескольких нижних уровней одиночного донора фосфора и параметры соответствующих волновых функций приведены в табл. 2. Видно, что величины энергий хорошо согласуются с экспериментальными данными [30,31].

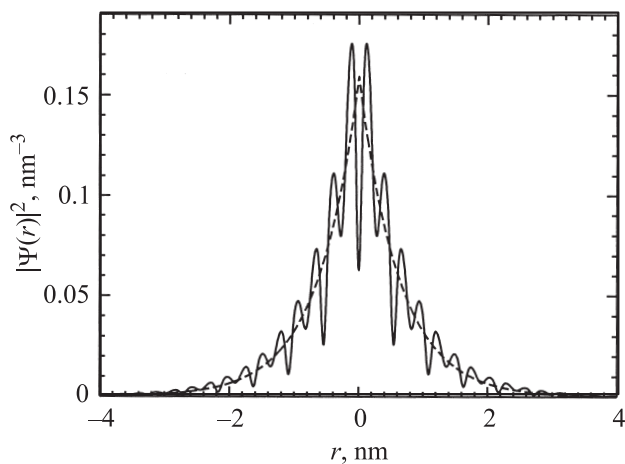


Рис. 1. Сплошная линия — электронная плотность основного состояния 1S(A_1) атома фосфора в кремнии вдоль кристаллографического направления [100]; пунктирная линия — квадрат модуля водородоподобной функции состояния 1S с боровским радиусом 1.26 нм. Атом находится в начале координат.

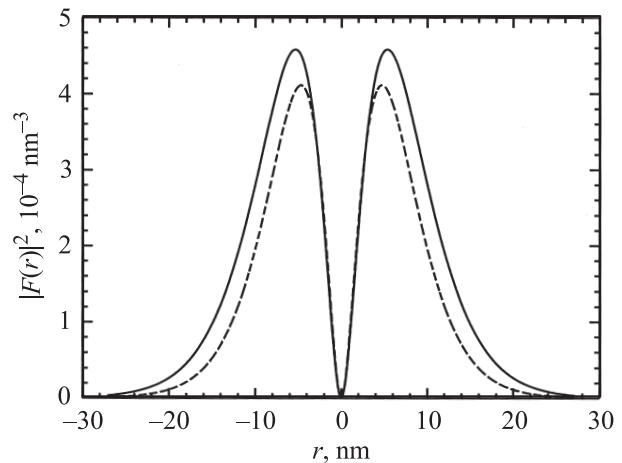


Рис. 2. Сплошная линия — квадрат модуля огибающей функции состояния 2P_±(T_{1x}) атома фосфора в кремнии вдоль направления [100]; пунктирная линия — квадрат модуля водородоподобной функции состояния 2P_± с боровским радиусом 4.66 нм. Атом находится в начале координат.

Отметим, что вырождение основного состояния, как и состояний 2S, 2P₀, 2P_±, появляющееся в простейшем приближении МЭМ [19,20], частично снимается. Кроме того, в этом приближении энергия основного состояния значительно больше, чем дает уточненная теория и эксперимент, поэтому для эффективных боровских радиусов получаются завышенные значения [19,20].

На рис. 1 и 2 приведены графики электронной плотности вблизи примесного атома фосфора в кремнии для состояний 1S(A_1) и 2P_±(T_1). Для сравнения на этих же графиках приведены электронные плотности, полученные с использованием изотропных водородоподобных волновых функций с боровскими радиусами, равными средним эффективным боровским радиусам каждого из состояний.

3. Энергетический спектр и волновые функции молекулярного иона P_2^+/Si

Рассмотрим однократно ионизированную пару атомов фосфора (A и B), помещенных в узлы кристаллической решетки кремния с векторами \mathbf{R}_A и \mathbf{R}_B соответственно. Будем считать, что атомы расположены на расстоянии не менее 5–10 нм, т.е. нескольких десятков периодов решетки кремния — много больше эффективных борровских радиусов, характеризующих область локализации волновой функции основного состояния атома фосфора. В системе имеется только один валентный электрон, гамильтониан которого можно записать как сумму гамильтониана чистого кремния H^0 и энергии кулоновского взаимодействия электрона с ионами:

$$H = H^0 + U(r - \mathbf{R}_A) + U(r - \mathbf{R}_B), \quad (6)$$

где $U(\mathbf{r})$ определяется выражением (2). Волновая функция электрона в отсутствие внешнего поля может быть представлена в виде линейной комбинации атомных орбиталей каждого из доноров:

$$\Psi\left(\frac{\rho}{r}\right) = \sum_{\gamma} \sum_n C_{n\gamma} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\gamma}), \quad (7)$$

где $\gamma = A, B$ нумерует доноры, n — номер орбитали. атомные орбитали определяются выражением [18,19]

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \sum_i \alpha_{ni} F_{ni}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — блоховские функции зоны проводимости.

Для определения энергетического спектра требуется знание интегралов перекрытия:

$$S_{nA,mB} = \int \psi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \psi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) d\mathbf{r}, \quad (9)$$

а также матричных элементов оператора кулоновского взаимодействия между электроном и ионом фосфора:

$$U_{nA,mB} = \int \psi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \psi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) d\mathbf{r}. \quad (10)$$

Используя выражение (8) и разложение периодической части блоховских волновых функций в ряд по векторам обратной решетки $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{k},\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r})$, получим

$$\begin{aligned} S_{nA,mB} &= \sum_{ij} \alpha_{ni}^* \alpha_{mj} \exp(i(\mathbf{k}_i \mathbf{R}_A - \mathbf{k}_j \mathbf{R}_B)) \\ &\times \int F_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) F_{mj}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) \exp(i(\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i)\mathbf{r}) \\ &\times \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} A_{\mathbf{k}_i, \mathbf{G}}^* A_{\mathbf{k}_j, \mathbf{G}'} \exp(i(\mathbf{G}' - \mathbf{G})\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (11)$$

Область изменения огибающих функций $F_i(\mathbf{r})$ много больше периода решетки a_{Si} . В показателе же экспоненты минимальная величина модуля разности волновых

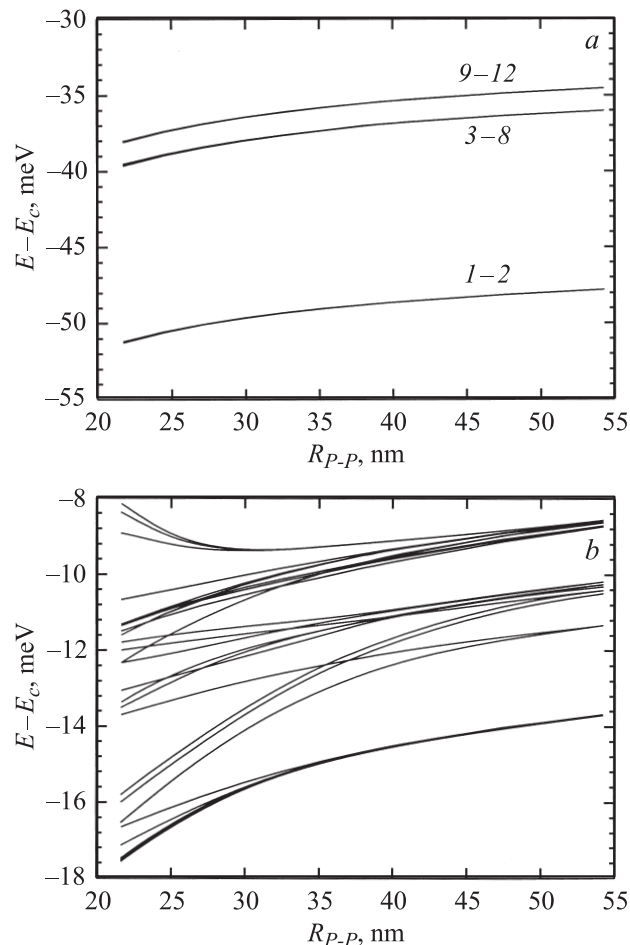


Рис. 3. Зависимость энергетического спектра системы P_2^+/Si от расстояния между атомами фосфора в кремнии (атомы расположены вдоль направления $[100]$, E_c — дно зоны проводимости); a — состояния 1–12 (нумерация состояний ведется начиная с нижних уровней), на рисунке приведены номера уровней в группах; b — состояния 13–60.

векторов при $i \neq j$ равна $|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j|_{\min} = 2\sqrt{2} \cdot 0.85\pi/a_{Si}$, т.е. экспонента осциллирует с периодом порядка периода решетки. Поэтому интегралы с $i \neq j$ оказываются очень малы, и в сумме по i, j можно оставить только члены с $i = j$. По этой же причине в сумме по векторам обратной решетки останутся только члены с $\mathbf{G} = \mathbf{G}'$. Из условия нормировки блоховских функций вытекает, что $\sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{k}_i, \mathbf{G}}^* A_{\mathbf{k}_j, \mathbf{G}} = 1$. В итоге получим

$$\begin{aligned} S_{nA,mB} &= \sum_i \alpha_{ni}^* \alpha_{mi} \exp(i\mathbf{k}_i(\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B)) \\ &\times \int F_{ni}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) F_{mi}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (12)$$

Область изменения потенциала в интеграле (10) также много больше a_{Si} . Поэтому, раскладывая блоховские функции по плоским волнам, мы оставляем в разложении только слагаемые с экспонентами, в показателе

которых разность волновых векторов равна нулю. При этом выражение (10) принимает вид

$$U_{nA,mB} = \sum_i \alpha_{ni}^* \alpha_{mi} \exp(i\mathbf{k}_i(\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B)) \times \int F_{ni}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) F_{mi}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) d\mathbf{r}. \quad (13)$$

Волновые функции одиночных доноров, локализованные на разных атомах, не ортогональны, поэтому нахождение энергетического спектра и волновых функций (7) представляет собой обобщенную задачу на собственные значения. В настоящей работе в разложении (7) использовались 30 волновых функций, локализованных на каждом атоме фосфора (включая все состояния 1S, 2S, 2P₀ и 2P_± одиночных доноров), что позволило найти 60 нижних состояний спектра системы P₂⁺/Si (рис. 3).

Величина расщепления атомных уровней энергии в молекулярном ионе определяется радиусами локализации соответствующих атомных волновых функций вблизи доноров и вектором $\mathbf{R}_{P-P} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$, соединяющим два атома фосфора. Радиусы локализации волновых функций нижних состояний небольшие, поэтому соответствующие атомные уровни слабо расщепляются при $|\mathbf{R}_{P-P}| > 20$ нм, и образующиеся из них молекулярные уровни формируют группы вырожденных или почти вырожденных уровней. При этом число уровней в каждой такой группе в 2 раза больше степени вырождения соответствующего атомного уровня (рис. 3). При $|\mathbf{R}_{P-P}| > 50$ нм спектр P₂⁺/Si близок к спектру одиночного атома фосфора.

Волновые функции, отвечающие 1S состояниям отдельных атомов, практически не гибридизируются с волновыми функциями вышележащих возбужденных состояний, так как соответствующие уровни отделены друг от друга большей энергетической щелью. Поэтому нижние молекулярные уровни можно рассматривать независимо от остального спектра. Так, вклад в волновые функции двух нижних уровней преимущественно дают волновые функции 1S(A₁) состояний отдельных доноров, образующие симметричную и антисимметричную комбинации:

$$\Psi_{1,2}(\mathbf{r}) \approx \frac{\psi_{1S(A_1)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \pm \psi_{1S(A_1)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)}{\sqrt{2(1 \pm S)}}, \quad (14)$$

где S — интеграл перекрытия функций, локализованных на разных донорах.

4. Переход электрона между донорами под действием лазерного импульса

Рассмотрим зарядовый кубит, логические состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ которого соответствуют электрону, локализованному на нижнем уровне донора A и B соответственно. Этим состояниям отвечают симметричная

и антисимметричная линейные комбинации волновых функций двух нижних уровней системы P₂⁺/Si (см. (14)). Возможность проведения операций над таким кубитом с использованием резонансных лазерных импульсов рассматривалась в работах [10,11]. При этом основной задачей является выбор оптимальных параметров импульсов и вспомогательного возбужденного („транспортного“) уровня, посредством которого осуществляются квантовые операции. В настоящей работе в качестве иллюстрации мы ограничимся рассмотрением операции NOT, которая отвечает переходу электрона с нижнего уровня одного донора на нижний уровень другого донора [12].

Эволюция электронного состояния определяется частотой ω лазерного импульса, а также матричными элементами оператора дипольного момента $\mathbf{d}_{nm} = \langle \Psi_m | -e\mathbf{r} | \Psi_n \rangle$ переходов электрона между состояниями кубита и возбужденными состояниями системы P₂⁺/Si. Численный расчет показывает, что в случае, когда излучение поляризовано вдоль оси симметрии системы (к примеру, вдоль оси Ox), а расстояние между атомами фосфора $\mathbf{R}_{P-P} > 60a_{Si} \approx 30$ нм, наибольшими по абсолютной величине (кроме диагональных) являются дипольные матричные элементы, соответствующие переходам на возбужденные уровни с волновыми функциями:

$$\Psi_{S,A}^{P_0}(\mathbf{r}) \approx \frac{\psi_{2P_0(T_{1x})}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \pm \psi_{2P_0(T_{1x})}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)}{\sqrt{2(1 \pm S_{2P_0})}}, \quad (15)$$

$$\Psi_{S,A}^{P_{\pm}}(\mathbf{r}) \approx \frac{\psi_{2P_{\pm}(T_{1x})}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \pm \psi_{2P_{\pm}(T_{1x})}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)}{\sqrt{2(1 \pm S_{2P_{\pm}})}},$$

где $\psi_{2P_0(T_{1x})}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\gamma)$, $\psi_{2P_{\pm}(T_{1x})}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\gamma)$ — волновые функции состояний 2P₀(T_{1x}) и 2P_±(T_{1x}) одиночного донора фосфора, локализованные вблизи донора $\gamma = A$ или B, S_{2P₀} и S_{2P_±} — интегралы перекрытия между соответствующими атомными волновыми функциями, стоящими в числителе (15). Энергии этих уровней (для атомов фосфора, расположенных вдоль кристаллографического направления [100] на расстоянии 100a_{Si} = 54.3 нм друг от друга) равны: E_{S^{P₀}} - E_c = -13.673898 мэВ, E_{A^{P₀}} - E_c = -13.673896 мэВ, E_{S^{P_±}} - E_c = -8.646 мэВ, E_{A^{P_±}} - E_c = -8.502 мэВ.

Выполненный нами анализ эволюции состояния электрона под действием лазерного излучения (путем численного решения нестационарного уравнения Шредингера) показал, что переход электрона между донорами действительно возможен. Для этого необходимо, чтобы частота излучения была настроена на „квазирезонансный“ уровень, лежащий строго посередине между уровнями $|\Psi_S^{2P_{\pm}}\rangle$ и $|\Psi_A^{2P_{\pm}}\rangle$ (см. (15)). Эта частота зависит от \mathbf{R}_{P-P} и для указанной конфигурации доноров составляет $\omega = 6.065 \cdot 10^{13}$ Гц.

Волновые функции уровней $|\Psi_{S,A}^{2P_{\pm}}\rangle$ имеют разную четность, поэтому соответствующие этим уровням матричные элементы взаимодействия электрона с полем на одном атоме складываются, а на другом — наоборот, вычитаются. Тем самым тормозится переход

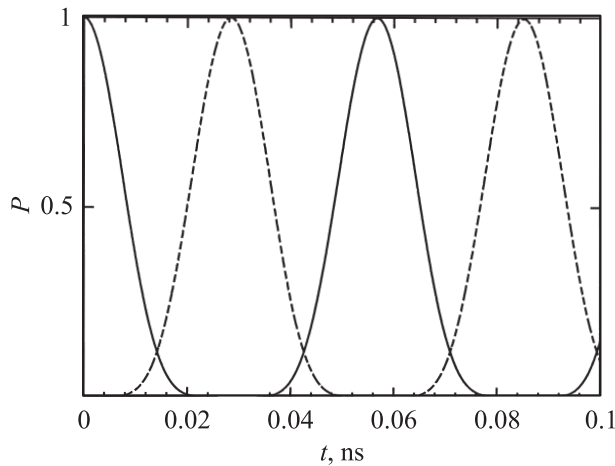


Рис. 4. Вероятности P нахождения электрона в основных состояниях донора A (сплошная линия) и донора B (пунктирная линия), отвечающих логическим состояниям кубита $|0\rangle$ и $|1\rangle$ соответственно, как функции времени действия лазерного излучения. Частота излучения настроена на квазирезонансный уровень, лежащий между уровнями $|\Psi_S^{2P\pm}\rangle$ и $|\Psi_A^{2P\pm}\rangle$ (см. текст). Амплитуда напряженности поля в импульсе $E = 920$ В/см.

электрона между донорами, причем тем больше, чем сильнее взаимодействие электрона с полем. Величиной, характеризующей энергию этого взаимодействия, является $d_{nm}E$, где E — амплитуда напряженности электрического поля в импульсе. Если энергия взаимодействия по модулю больше разности энергий транспортных уровней $\Delta E_{S,A}^{2P\pm} \approx 0.01-0.1$ мэВ, то переходы электрона между донорами не реализуются. Вместо этого происходят независимые возбуждения доноров. С уменьшением интенсивности излучения вероятность перехода P возрастает: максимальная вероятность перехода $P = 0.8774$ для $E \approx 2 \cdot 10^4$ В/см (при этом время операции $t_{op} \approx 52$ пс); $P = 0.9354$ для $E = 1.84 \cdot 10^3$ В/см ($t_{op} \approx 32$ пс); $P = 0.99995$ для $E = 920$ В/см ($t_{op} \approx 29$ пс) (см. рис. 4). При дальнейшем уменьшении интенсивности излучения время операции быстро растет. Так, для $E = 92$ В/см мы получили $t_{op} \approx 1.3$ нс, что сравнимо с временем декогеренции. Кроме того, время операции растет при отстройке частоты лазерного излучения от квазирезонансного уровня. Например, для $E = 920$ В/см и отстройки $\Delta\omega = 9.5 \cdot 10^{11}$ Гц ($\eta\Delta\omega = 6 \cdot 10^{-4}$ эВ) имеем $P = 0.9992$ и $t_{op} \approx 0.4$ нс.

При $|R_{p-p}| > 50$ нм уровни молекулярного иона $|\Psi_S^{2P_0}\rangle$ и $|\Psi_A^{2P_0}\rangle$ оказываются практически вырожденными: $\Delta E_{S,A}^{2P_0} \approx 10^{-6}$ мэВ. Следовательно, для проведения квантовых операций необходимы существенно меньшие интенсивности полей, в результате чего время перехода электрона между донорами значительно превышает время декогеренции. Поэтому использование этих уровней в качестве транспортных невозможно, несмотря на то

что дипольные матричные элементы переходов на уровни $|\Psi_{S,A}^{2P_0}\rangle$ велики.

5. Заключение

Основными результатами данной работы являются: 1) расчет энергетического спектра и волновых функций однократно ионизированной пары доноров фосфора в кремнии P_2^+/Si и 2) демонстрация возможности переноса электрона между донорами путем воздействия на систему лазерного импульса малой интенсивности. Перенос электрона осуществляется за время $t_{op} \approx 10$ пс, что меньше времени декогеренции $\tau \approx 1$ нс. Тем не менее отношение $t_{op}/\tau \approx 10^{-2}$ оказывается недостаточно велико для организации полномасштабных квантовых вычислений с зарядовыми кубитами на основе P_2^+/Si .

Список литературы

- [1] К.А. Валиев. УФН, **175**, 3 (2005).
- [2] B.E. Kane. Nature, **393**, 133 (1998).
- [3] C.J. Wellard, L.C.L. Hollenberg, F. Parisoli, L.M. Kettle, H.-S. Goan, J.A.L. McIntosh, D.N. Jamieson. Phys. Rev. B, **68** (19), 5209 (2003).
- [4] A. Fang, Y.-C. Chang, J.R. Tucker. Phys. Rev. B, **72** (7), 5355 (2005).
- [5] B. Koiller, X. Hu, S. Das Sarma. Phys. Rev. Lett., **88** (2), 7903 (2002).
- [6] S. Das Sarma, R. de Sousa, X. Hu, B. Koiller. Sol. St. Commun., **133**, 737 (2005).
- [7] X. Hu, B. Koiller, S. Das Sarma. Phys. Rev. B, **71** (23), 5332 (2005).
- [8] B. Koiller, X. Hu, S. Das Sarma. Phys. Rev. B, **73** (4), 5319 (2006).
- [9] A.S. Martins, R.B. Capaz, B. Koiller. Phys. Rev. B, **69** (8), 5320 (2004).
- [10] L.A. Openov. Phys. Rev. B, **70** (23), 3313 (2004).
- [11] Л.А. Опенов. ЖЭТФ, **127**, 973 (2005).
- [12] L.A. Openov. Phys. Rev. B, **60**, 8798 (1999).
- [13] J.H. Oh, D. Ahn, S.W. Hwang. Phys. Rev. A, **62** (5), 2306 (2000).
- [14] А.В. Цуканов, Л.А. Опенов. ФТП, **38**, 94 (2004).
- [15] Л.А. Опенов, А.В. Цуканов. Письма ЖЭТФ, **80**, 572 (2004).
- [16] Z. Kis, E. Paspalakis. Phys. Rev. B, **69** (2), 4510 (2004).
- [17] C. Kittel, A.H. Mitchell. Phys. Rev., **96**, 1488 (1954).
- [18] L.M. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev., **97**, 869 (1955).
- [19] W. Kohn, J.M. Luttinger. Phys. Rev., **98**, 915 (1955).
- [20] R.A. Faulkner. Phys. Rev., **184**, 713 (1969).
- [21] J. Hermanson, J.C. Phillips. Phys. Rev., **150**, 652 (1966).
- [22] A. Baldereschi. Phys. Rev. B, **1**, 4673 (1970).
- [23] T.H. Ning, C.T. Sah. Phys. Rev., B, **4**, 3468 (1971).
- [24] S.T. Pantelides, C.T. Sah. Phys. Rev. B, **10**, 621 (1974).
- [25] J.L. Ivey, R.L. Miehler. Phys. Rev. B, **11**, 822 (1975).
- [26] B. Koiler, R.B. Capaz, X. Hu, S. Das Sarma. Phys. Rev. B, **70** (11), 5207 (2004).
- [27] C.J. Wellard, L.C.L. Hollenberg. Phys. Rev. B, **72** (8), 5202 (2005).
- [28] W.D. Twose by H. Fritzsche. Phys. Rev., **125**, 1560 (1962).
- [29] E. Palaniyandi, T.V. Malliga. Phys. Rev. B, **38**, 13 197 (1988).

- [30] R.L. Aggarwal, A.K. Ramdas. Phys. Rev., **140**, 1246 (1965).
[31] A.J. Mayur, M. Dean Sciacca, A.K. Ramdas, S. Rodrigues.
Phys. Rev. B, **48**, 10 893 (1993).

Редактор Л.В. Беляков

Electronic characteristics of the ionized pair of phosphorus donors in silicon and charge qubit quantum operations

A.N. Voron'ko

Moscow Engineering Physics Institute
(State University),
115409 Moscow, Russia

Abstract Electronic energy spectrum of the ionized pair of phosphorus dopants in silicon P_2^+/Si was numerically calculated taking six-degenerate minima of the conduction band into account. The envelope functions of different states were found as well. The results obtained are used for simulation of quantum operations with P_2^+/Si -based charge qubits due to laser pulse excitations.