

## Структуры с вертикально совмещенными квантовыми точками Ge/Si для логических операций

© Ю.Н. Мороков<sup>¶</sup>, М.П. Федорук, А.В. Двуреченский\*, А.Ф. Зиновьева\*, А.В. Ненашев\*

Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

\* Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

(Получена 28 декабря 2011 г. Принята к печати 13 января 2012 г.)

Представлены результаты моделирования Ge/Si структур с вертикально совмещенными квантовыми точками для реализации базовых элементов квантового компьютера, ориентированных на работу с электронными спиновыми состояниями. Для моделирования полей упругих деформаций использовался метод сопряженных градиентов и атомистическая модель на основе потенциала Китинга. Расчеты проведены в кластерном приближении с использованием кластеров, содержащих около 3 миллионов атомов, принадлежащих 150 координационным сферам. Рассчитаны пространственные распределения плотности энергии деформации и потенциальной энергии электронов для разных долин, формирующих дно зоны проводимости кремния. Показано, что создание многослойных структур с вертикально совмещенными квантовыми точками позволяет создать глубокие потенциальные ямы для электронов с возможностью организации туннельной связи по вертикали.

### 1. Введение

В настоящее время как за рубежом, так и в России ведутся работы по созданию элементной базы для квантовых вычислений. Исследования проводятся по нескольким направлениям: использование квантовых состояний отдельных частиц в электромагнитных ловушках при низких и сверхнизких температурах, управление распространением электромагнитных волн в фотонных кристаллах, реализация кубитов на твердотельной основе: сверхпроводящие кубиты [1], NV-центры в алмазе [2], примесные атомы фосфора в кремнии [3], а также полупроводниковые квантовые точки, в которых носителем информации может быть как спиновое состояние [4], так и зарядовое состояние [5] локализованного электрона или дырки. Настоящая работа посвящена поиску возможностей локализации электронов в многослойных структурах Ge/Si с квантовыми точками с целью использования локализованных состояний носителей заряда в качестве кубитов.

При эпитаксиальном росте германия на кристаллическом кремнии на гетерогранице возникают упругие напряжения из-за различных постоянных решеток германия и кремния. В начале роста формируется напряженный смачивающий слой, состоящий из нескольких атомарных слоев германия. При последующем росте на поверхности смачивающего слоя формируются пирамидальные островки. Ключевую роль в процессах самоорганизации получающихся наноструктур играют неоднородные упругие деформации в системе [6,7]. Образующиеся островки размерами в десятки нанометров рассматриваются как квантовые точки, поскольку локализуемые в них носители заряда имеют дискретный спектр.

Как правило, каждая работа, посвященная моделированию электронной структуры самоформирующихся

квантовых точек, начинается с расчета распределения упругой деформации. Это связано с тем, что деформация вызывает изменение (искажение) зонной структуры полупроводниковых материалов и поэтому влияет на форму потенциальной ямы для электронов и дырок в полупроводниках. Наибольшее количество работ по моделированию электронной структуры и распределению деформации в самоформирующихся квантовых точках относится к системе InGa/GaAs [8,9], но есть работы и по квантовым точкам в гетеросистемах Ge/Si [9–11], InGaN/GaN [12], InP [13].

В гетеросистеме Ge/Si дырки локализуются преимущественно в объеме квантовых точек, в области германия. Захваченные электроны локализуются преимущественно в кремнии и потенциальные ямы для них формируются за счет упругой деформации слоев кремния, окружающих квантовые точки [10], вблизи вершин квантовых точек и под их основаниями. Из-за их деформаций в этих областях происходит наибольшее расщепление шестикратно вырожденной  $\Delta$ -долины зоны проводимости. Две долины,  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$ , ориентированные вдоль направлений  $[001]$  и  $[00\bar{1}]$ , опускаются по энергии вниз, остальные четыре поднимаются вверх. Локализованные состояния электронов строятся из состояний двух нижних  $\Delta$ -долин.

В процессе эпитаксиального роста при определенных условиях возможно формирование вертикально совмещенных (вдоль направления роста) структур из германиевых островков. Деформированное поле, создаваемое в кремнии германиевым островком очередного слоя, создает благоприятные условия для зарождения островка в следующем выращиваемом слое [14]. В таких вертикальных структурах при определенных расстояниях между слоями квантовых точек деформированные поля складываются, и происходит увеличение глубины потенциальной ямы для электронов. Недавно это было

<sup>¶</sup> E-mail: quant@ict.nsc.ru

продемонстрировано для четырехслойной структуры с вертикально совмещенными квантовыми точками [15]. Энергия локализованного электрона в центральном слое вблизи вершины квантовой точки достигала 60 мэВ.

Вертикальную структуру из квантовых точек, формирующуюся в процессе роста можно рассматривать в качестве возможного базового элемента квантового компьютера. Такой базовый элемент квантового компьютера имеет ряд заметных потенциальных преимуществ перед другими возможными вариантами:

- 1) пространственная самоорганизация вертикальной структуры в процессе роста;
- 2) масштабность по числу вертикально упорядоченных элементов;
- 3) возможность технологически удобным путем в режиме реального времени детально контролировать параметры каждого кубита;
- 4) в процессе роста на каждом смачивающем слое выращиваются большие массивы близких по параметрам квантовых точек. Это ведет к возможности рассматривать большие массивы параллельно работающих вычислительных элементов.

В качестве конкретного примера кубита можно рассматривать спиновые состояния электрона, локализованного вблизи вершины квантовой точки. Однако при таком рассмотрении возникает одна серьезная проблема — между соседними кубитами, совмещенными по вертикали, существует достаточно высокий потенциальный барьер, толщина которого равна высоте квантовой точки, что затрудняет решение задачи организации туннельного взаимодействия между электронами. Этого недостатка лишены возможные электронные состояния, соответствующие долинам  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{\bar{1}00}$ . Такие состояния локализованы в кремнии вблизи ребер на основании квантовой точки и соответственно по вертикали их отделяет друг от друга минимально возможная толщина слоя атомов германия.

Рассмотрим возможность создания вертикальных структур из квантовых точек, в которых электронные состояния, локализованные в кремнии вблизи квантовых точек, будут в основном построены из состояний долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{\bar{1}00}$ .

Первая задача, которую надо решить для практической работы с электронами этих долин, — это попытаться минимизировать влияние конкурирующих более глубоких по энергии долин типа  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$ . Для решения этой задачи рассмотрим случай формирования вертикальных структур с максимально близким расположением квантовых точек по вертикали, исключающим прослойку кремния в области вершин квантовых точек. Такая ситуация экспериментально вполне реализуема, как показано в недавних работах по созданию стекловых структур с вертикально совмещенными квантовыми точками [16]. Для приближения к эксперименту будем рассматривать структуры с частичным перекрытием объемов пирамидальных квантовых точек. Такое построение позволяет реализовать стек из усеченных пирамид, что, как правило, и наблюдается в эксперименте.

В данной работе проведена теоретическая проверка возможности создания локализованных состояний электронов, туннельно-связанных по вертикали, в гетероструктурах Ge/Si с вертикально совмещенными квантовыми точками. Для этого рассчитаны пространственные распределения плотности энергии деформации и потенциальной энергии электронов в окрестности квантовых точек для разных долин, формирующих дно зоны проводимости кремния. Для расчета деформации использован атомистический подход, учитывающий реальную алмазоподобную решетку.

## 2. Описание подхода

Для моделирования полей упругих деформаций внутри квантовых точек и в их окрестности нами ранее применялась дискретно-континуальная модель [17], использующая потенциал Китинга. Часть атомов в этой модели рассматривалась в явном виде, а влияние остальных атомов учитывалось через численно рассчитываемую функцию Грина. В отличие от работы [17] в данной работе используется более точная, атомистическая модель и кластерное приближение. Первоначально все атомы располагаются в узлах идеальной алмазоподобной решетки кремния с постоянной решетки  $a_{\text{Si}} = 0.357 \text{ нм}$ , что соответствует длине связи Si–Si, равной  $l_{\text{Si-Si}} = 0.235 \text{ нм}$ . При этом расстояние между соседними атомными слоями в направлении [001] равно  $b_{\text{Si}} = a_{\text{Si}}/4 = 0.094 \text{ нм}$ . Замена отдельных атомов кремния на атомы германия в этой решетке приводит к возникновению локальных напряжений в структуре из-за несовпадения равновесных длин связей Si–Si, Si–Ge и Ge–Ge. Предполагается, что последующая упругая релаксация в системе сохраняет топологию межатомных связей алмазоподобной структуры.

Мы рассматриваем однослойные и многослойные структуры, состоящие из квантовых точек, расположенных на смачивающих слоях толщиной в 5 атомных слоев. Квантовые точки представляют собой пирамиды с квадратным основанием и отношением высоты к размеру основания 1:10. Вычисленные кластеры строятся путем последовательного наращивания числа координационных сфер, начиная с некоторого центрального атома. Основные расчеты проводятся для кластеров, содержащих атомы 150 координационных сфер, при этом центральный атом кластера считается принадлежащим нулевой координационной сфере. Кластер из 150 координационных сфер содержит 2840951 атом.

Используются следующие граничные условия для кластеров. Для атомов двух внешних координационных сфер (в которые уже входят и атомы бесконечного в  $x$  и  $y$  направлениях смачивающего слоя германия) фиксируются  $x$  и  $y$  координаты, но полностью освобождаются для релаксации  $z$ -координат всех атомов (вдоль направления роста).

При упругой релаксации системы минимизируется функционал энергии системы, который имеет вид (потенциал Китинга) [18]:

$$E_{\text{упр}} = \frac{3}{16} \sum_i \sum_j \frac{\alpha_{ij}}{l_{ij}^2} [(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 - l_{ij}^2]^2 + \frac{3}{8} \sum_i \sum_{j>k} \frac{\beta_{ijk}}{l_{ij} \cdot l_{ik}} \left[ (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k) + \frac{1}{3} l_{ij} \cdot l_{ik} \right]^2,$$

где  $\mathbf{r}_i$  — радиус-вектор  $i$ -го атома;  $\alpha_{ij}$ ,  $\beta_{ijk}$  и  $l_{ij}$  — параметры, зависящие от сорта атомов  $i$ ,  $j$  и  $k$ ; индекс  $i$  нумерует все атомы кластера, а индексы  $j$  и  $k$  нумеруют ближайших соседей  $i$ -го атома. Параметры  $\alpha_{ij}$  и  $\beta_{ijk}$  играют роль силовых констант, а  $l_{ij}$  — равновесные длины связей между атомами. Значения параметров потенциала взяты такими же, как и в [17].

Полная энергия системы представляется в виде суммы величин  $E_i$ , соответствующих вкладам отдельных атомов системы:

$$E_i = \frac{3}{16} \sum_j \frac{\alpha_{ij}}{l_{ij}^2} [(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 - l_{ij}^2]^2 + \frac{3}{8} \sum_{j>k} \frac{\beta_{ijk}}{l_{ij} \cdot l_{ik}} \left[ (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k) + \frac{1}{3} l_{ij} \cdot l_{ik} \right]^2.$$

Величину  $E_i$  можно интерпретировать как долю упругой энергии, связанную с  $i$ -м атомом.

Для минимизации энергии системы мы используем метод сопряженных градиентов. Численный расчет заканчивается, когда величина изменения полной энергии кластера на одном шаге сопряженных градиентов становится на 14 порядков меньше, чем полная энергия кластера. Ограничение на точность обусловлено ошибками округления при использовании чисел двойной точности.

Для расчета локализованных одночастичных квантовых состояний электрона вблизи квантовой точки эффективную потенциальную энергию электрона можно представить как сумму потенциальной энергии без учета деформации решетки и потенциала, связанного с упругой деформацией. Если использовать приближение эффективной массы и за начало отсчета энергии электрона выбрать дно зоны проводимости, то потенциальная энергии электрона в напряженном кремнии сведется к энергии, связанной с упругой деформацией решетки.

Деформация решетки, вообще говоря, снимает вырождение долин, и энергия электрона для разных долин будет иметь следующий вид [19]:

$$\begin{aligned} \text{для } \Delta^{100} \text{ и } \Delta^{\bar{1}00} \quad U_e &= \Xi_d \cdot u(\mathbf{r}) + \Xi_u \cdot U_{xx}(\mathbf{r}), \\ \text{для } \Delta^{010} \text{ и } \Delta^{0\bar{1}0} \quad U_e &= \Xi_d \cdot u(\mathbf{r}) + \Xi_u \cdot U_{yy}(\mathbf{r}), \\ \text{для } \Delta^{001} \text{ и } \Delta^{00\bar{1}} \quad U_e &= \Xi_d \cdot u(\mathbf{r}) + \Xi_u \cdot U_{zz}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Здесь  $\Xi_d$  и  $\Xi_u$  — константы деформационного потенциала,  $u_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$  — тензор деформации в точке  $\mathbf{r}$ ;

$u(\mathbf{r}) = u_{xx}(\mathbf{r}) + u_{yy}(\mathbf{r}) + u_{zz}(\mathbf{r})$  — след тензора деформации. Нами использовались те же константы деформационного потенциала для Si и Ge, что и в [19].

Для расчета компонент тензора деформации использовался следующий подход [17]. Рассмотрим деформацию тетраэдра, составленного из ближайших соседей некоторого узла решетки. Форма тетраэдра задается шестью параметрами — например, длинами его ребер. Таким образом, деформация этого тетраэдра однозначно определяет шесть компонент тензора деформации, связанного с данным узлом решетки.

### 3. Результаты

Для проверки используемой модели были проведены расчеты для одиночных квантовых точек Ge/Si разных размеров с полушириной основания от 20 до 140 атомарных слоев. На рис. 1–3 представлены результаты для одиночной квантовой точки с полушириной основания в 100 атомарных слоев. На рис. 1 показано распределение объемной плотности энергии деформации в кремнии в центральном сечении ( $y = 0$ ) кластера. Выбор сечения  $y = 0$  связан с тем, что именно в этом сечении наблюдаются наибольшие значения рассматриваемых нами величин. Мы рассматриваем распределение деформационной энергии только в кремнии, поскольку распределения в германии были достаточно детально проанализированы ранее [17] в рамках предыдущей дискретно-континуальной модели. В согласии с нашими предыдущими расчетами [10] было получено, что потенциальные ямы для электронов в  $\Delta^{001}$ - и  $\Delta^{00\bar{1}}$ -долинах кремния образуются в окрестности оси симметрии квантовой точки — под основанием пирамиды и над ее вершиной. Согласно проведенным нами кластерным расчетам, глубина этих потенциальных ям составляет: 358 мэВ

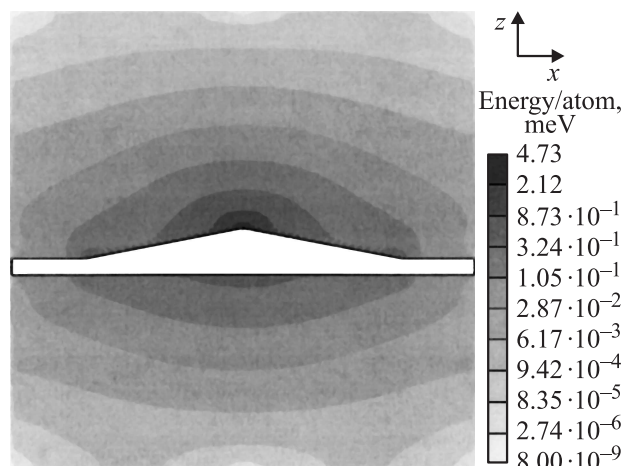
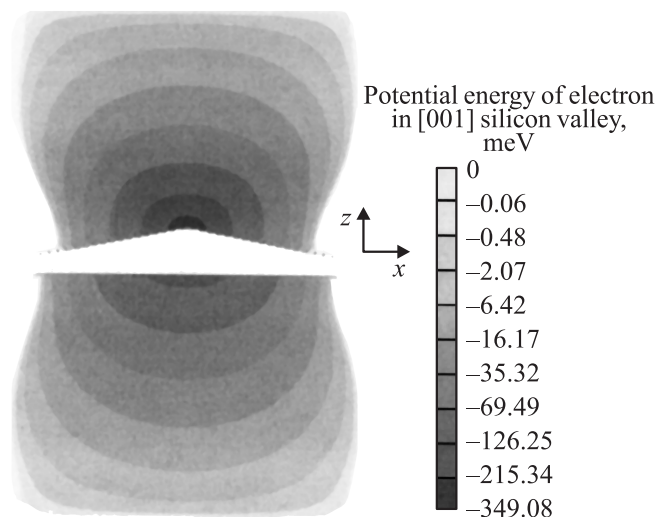
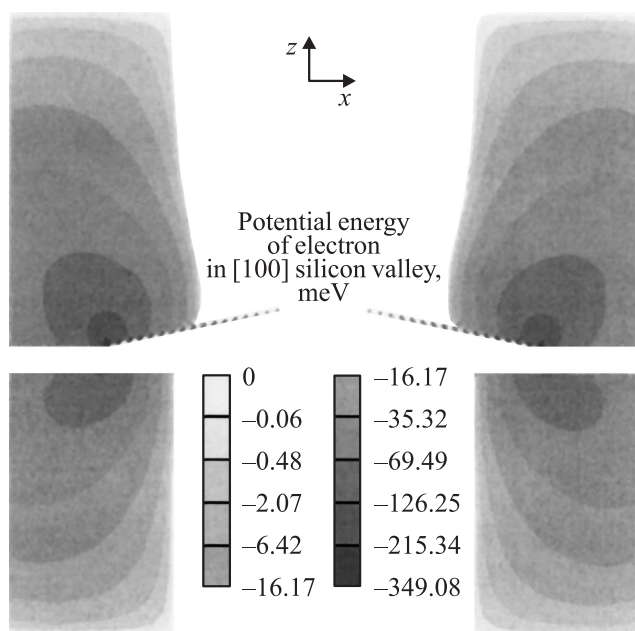


Рис. 1. Распределение объемной плотности энергии деформации в кремнии в центральном сечении кластера, содержащего одиночную квантовую точку с полушириной основания в 100 атомарных слоев.



**Рис. 2.** Распределение потенциальной энергии электрона в кремнии для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  в центральном сечении кластера, содержащего одиночную квантовую точку с полушириной основания в 100 атомарных слоев.



**Рис. 3.** Распределение потенциальной энергии электрона в кремнии для долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{10\bar{0}}$  в центральном сечении кластера, содержащего одиночную квантовую точку с полушириной основания в 100 атомарных слоев.

(над вершиной пирамиды) и 161 мэВ (под основанием пирамиды). Соответствующее распределение плотности потенциальной энергии электрона приведено на рис. 2.

На рис. 3 приведено распределение потенциальной энергии для электронных состояний долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{10\bar{0}}$ . Потенциальные ямы, образующиеся в окрестности оснований квантовых точек, над и под смачивающим слоем, имеют глубины 124 и 62 мэВ, что гораздо меньше, чем глубина потенциальных ям для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$ .

Нами были проведены расчеты структур, состоящих из двух вертикально совмещенных квантовых точек с полушириной основания в 100 атомарных слоев. В этой серии расчетов изменялось расстояние между центрами квантовых точек. Наименьшее рассмотренное расстояние составляло 16 атомарных слоев, что соответствует заметному перекрытию пирамид. При сближении квантовых точек с больших расстояний глубины двух внешних потенциальных ям (для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$ ) возрастают по величине, пока пирамиды еще не пересекаются. Но с увеличением степени перекрытия пирамид глубина ям снова начинает уменьшаться по величине. Это в общем-то согласуется с задачей уменьшения влияния потенциальных ям этого типа. Для структуры с расстоянием в 16 атомарных слоев между центрами перекрывающихся пирамид глубины двух внешних потенциальных ям для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  равны 182 мэВ (нижняя) и 410 мэВ (верхняя). Для долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{10\bar{0}}$  максимальная глубина 173 мэВ достигается над нижним смачивающим слоем. Все эти значения превышают по величине соответствующие глубины потенциальных ям для случая одной квантовой точки.

Для долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{10\bar{0}}$  сближение квантовых точек с больших расстояний ведет к монотонному увеличению глубины рассматриваемых потенциальных ям. При пересечении пирамид эта тенденция сохраняется.

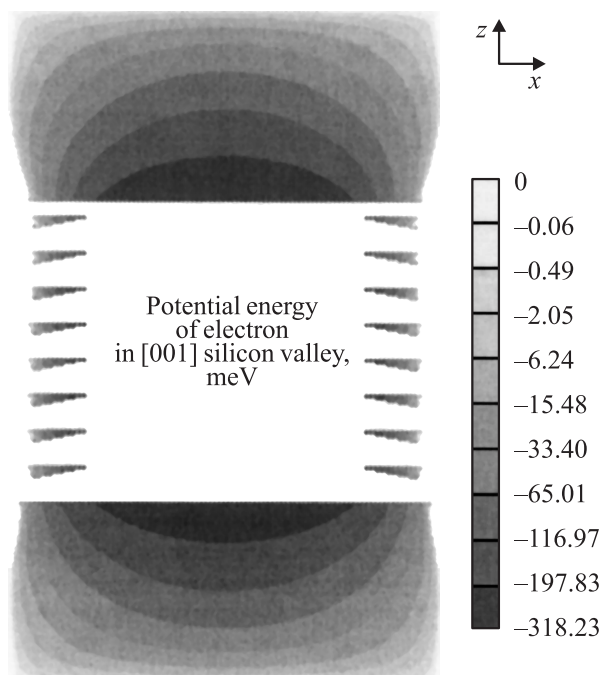
Таким образом, формирование структуры с пересекающимися пирамидами практически устраняет потенциальные ямы для долин кремния  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  вблизи вертикальной оси системы в объеме между смачивающими слоями. В двух же внешних областях потенциальные ямы для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  остаются и становятся глубже.

Для уменьшения наиболее глубокой внешней потенциальной ямы для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$ , которая формируется над вершиной верхней квантовой точки, проще всего вообще отказаться от выращивания квантовых точек на самом верхнем смачивающем слое.

Расчеты показывают, что глубина потенциальной ямы под нижним смачивающим слоем практически не меняется при изменении расстояния между смачивающими слоями при отсутствии обрезания пирамиды. В то же время уменьшение расстояния при наличии обрезания пирамиды быстро уменьшает глубину этой потенциальной ямы.

Таким образом, обрезание пирамиды сверху простым смачивающим слоем (на котором уже нет квантовых точек) устраняет потенциальные ямы для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  во внутренней области между смачивающими слоями и существенно уменьшает такие ямы во внешних областях (под нижним смачивающим слоем и над верхним смачивающим слоем).

Теперь рассмотрим вертикальную структуру из девяти равноудаленных смачивающих слоев равной толщины с расстоянием между центрами смачивающих слоев в 16 атомарных слоев. На восьми нижних слоях выращены одинаковые квантовые точки с полушириной



**Рис. 4.** Распределение потенциальной энергии электрона в кремнии для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  в центральном сечении структуры с 8 слоями квантовых точек.

оснований в 100 атомарных слоев. На рис. 4 представлено распределение потенциальной энергии электрона в кремнии для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  в центральном сечении многослойной структуры. Энергии деформации в кремнии заметно увеличиваются во всех областях многослойной структуры. Это связано с увеличением давления возросшего массива атомов германия и более существенными геометрическими ограничениями для релаксации атомов кремния во внутренних областях исследуемой структуры. Максимальная глубина потенциальной ямы для электрона в кремнии для рассматриваемых долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  в центральном сечении ( $y = 0$ ), изображенном на рис. 4, равна 318 мэВ. В то же время для данного кластера наибольшая глубина, равная 411 мэВ, достигается на атомах кремния не в сечении  $y = 0$ , а в латеральном сечении ( $z = \text{const}$ ), соответствующем второму слою атомов кремния под пятым, если отсчитывать снизу, смачивающим слоем. Наиболее глубокие минимумы потенциала расположены на атомах кремния вблизи вершин квадрата верхнего среза четвертой пирамиды.

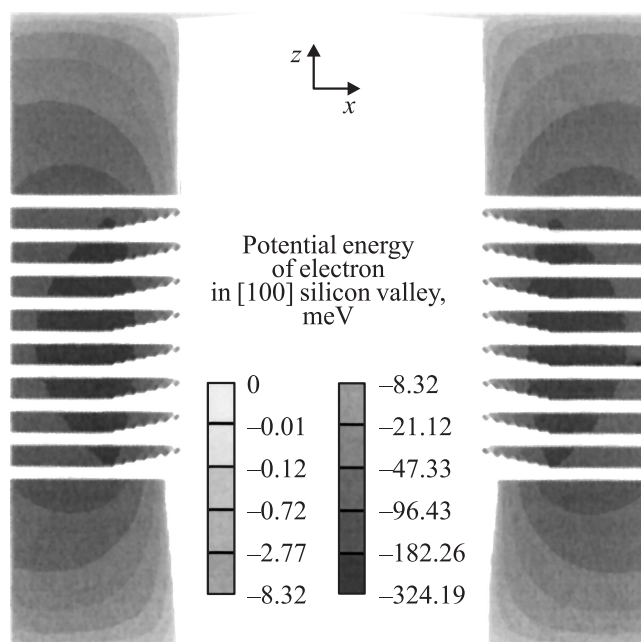
Несмотря на то что максимальная глубина потенциальных ям для долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$  достигается на центральных слоях многослойной структуры, эти ямы вряд ли способны захватывать электроны, поскольку они, как это видно из рис. 4, имеют очень малые пространственные размеры, и прежде всего в  $z$  направлении, соответствующем рассматриваемым долинам. Более существенным представляется наличие двух пространственно широких внешних ям: над верхним смачивающим слоем

и под нижним смачивающим слоем. Это ямы хорошо видны на рис. 4.

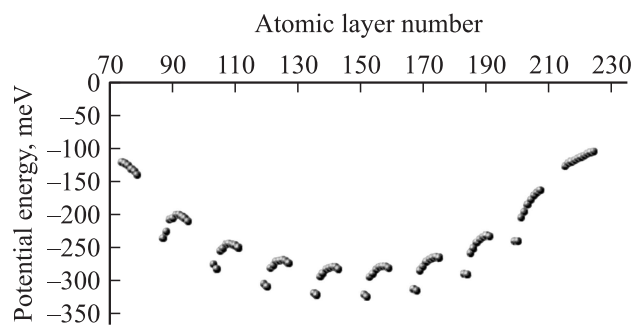
Для обеих потенциальных ям на рис. 4 наибольшая глубина достигается на вертикальной оси системы. Для более глубокой верхней ямы получено значение глубины 318 мэВ.

Заметная глубина рассматриваемых внешних ям мешает нам в реализации поставленной задачи — подавления влияния электронных состояний долин  $\Delta^{001}$  и  $\Delta^{00\bar{1}}$ . Возникает задача — либо привлечь другие способы подавления этих внешних ям, либо, наоборот, использовать в какой-либо форме наличие этих ям в квантовых алгоритмах.

Распределение потенциальной энергии электрона для долин кремния  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{10\bar{0}}$  в центральном сечении



**Рис. 5.** Распределение потенциальной энергии электрона в кремнии для долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{10\bar{0}}$  в центральном сечении структуры с 8 слоями квантовых точек.



**Рис. 6.** Распределение потенциальной энергии электрона в кремнии для долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{10\bar{0}}$  структуры с 8 слоями квантовых точек. Каждая точка на графике соответствует минимальной энергии на соответствующем латеральном атомарном слое кластера.

Значения потенциальной энергии электрона (мэВ) для дна потенциальных ям в долинах  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{100}$  для структуры с 8 слоями квантовых точек. Приведены наименьшие значения для каждого кремниевого слоя

Номер кремниевого слоя							
1	2	3	4	5	6	7	8
-236.676	-283.824	-310.282	-322.688	-324.193	-314.884	-290.727	-241.078

обсуждаемой многослойной структуры приведено на рис. 5. Наибольшая глубина потенциальных ям для этих долин 324 мэВ достигается при  $y = 0$  в латеральном сечении ( $z = \text{const}$ ), соответствующем третьему слою атомов кремния над пятым смачивающим слоем системы.

На рис. 6 приведен график зависимости наименьших на каждом латеральном слое рассматриваемого кластера значений потенциальной энергии электрона в кремнии для долин  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{100}$ . По оси абсцисс отложен номер атомарного слоя кластера вдоль вертикальной оси  $z$ .

В таблице приведены соответствующие рис. 6 числовые значения энергий (в мэВ), являющихся наименьшими для каждого из восьми кремниевых слоев рассматриваемой структуры.

Таким образом, в данной работе представлены результаты моделирования структур Ge/Si с вертикально совмещенными квантовыми точками для возможной реализации твердотельных базовых элементов квантового компьютера. Проведенные расчеты показали возможность создания многослойных структур, ориентированных на работу с электронами в долинах  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{100}$ . Для таких структур легче организовать контролируемое туннельное взаимодействие между электронами соседних слоев, что позволило бы формировать на их основе последовательные квантовые регистры для квантовых вычислений. Однако вопрос о эффективности локализации электронов в долинах  $\Delta^{100}$  и  $\Delta^{100}$  требует дальнейших исследований, включающих в себя квантово-механические расчеты.

Работа выполнена в рамках Интеграционного проекта СО РАН № 43 „Разработка физических принципов построения логических элементов на основе наноструктур с квантовыми точками“.

## Список литературы

- [1] M.H. Devoret, A. Wallraff, J.M. Martinis. arXiv:cond-mat/0411174 (2004).
- [2] M.V. Gurudev Dutt, L. Childress, L. Jiang, E. Togan, J. Maze, F. Jelezko, A.S. Zibrov, P.R. Hemmer, M.D. Lukin. Science, **316**, 1312 (2007).
- [3] B.E. Kane. Nature, **393**, 133 (1998).
- [4] D. Loss, D.P. DiVincenzo. Phys. Rev. A, **57**, 120 (1998).
- [5] L. Fedichkin, M. Yanchenko, K.A. Valiev. Nanotechnology, **11**, 387 (2000).
- [6] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д. Бимберг. ФТП, **32**, 385 (1998).

- [7] О.П. Пчеляков, Ю.Б. Болховитянов, А.В. Двуреченский, Л.В. Соколов, А.И. Никифоров, А.И. Якимов, Б. Фойхтлендер. ФТП, **34**, 1281 (2000).
- [8] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg. Phys. Rev. B, **59**, 5688 (1999).
- [9] M. Califano, P. Harrison. J. Appl. Phys., **91**, 389 (2002).
- [10] A.V. Dvurechenskii, A.V. Nenashev, A.I. Yakimov. Nanotechnology, **13**, 75 (2002).
- [11] K. Brunner. Rep. Progr. Phys., **65**, 27 (2002).
- [12] T. Saito, Y. Arakawa. Physica E, **15**, 169 (2002).
- [13] H. Fu, A. Zunger. Phys. Rev. B, **56**, 1496 (1997).
- [14] J. Tersoff, C. Teichert, M.G. Lagally. Phys. Rev. Lett., **76**, 1675 (1996).
- [15] А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, А.А. Блошкин, А.В. Ненашев. Письма ЖЭТФ, **83**, 189 (2006).
- [16] D. Grutzmacher, T. Fromherz, C. Dais, J. Stangl, E. Muller, Y. Ekinici, H.H. Solak, H. Sigg, R.T. Lechner, E. Wintersberger, S. Birner, V. Holy, G. Bauer. Nano Lett., **7**, 3150 (2007).
- [17] А.В. Ненашев, А.В. Двуреченский. ЖЭТФ, **118**, 570 (2000).
- [18] P.N. Keating. Phys. Rev., **145**, 637 (1966).
- [19] C.G. Van de Walle. Phys. Rev. B, **39** 1871 (1989).

Редактор Л.В. Беляков

## Structures with stacked quantum dots for logical operations

Yu. Morokov, M.P. Fedoruk, A.V. Dvurechenskii\*, A.F. Zinov'eva\*, A.V. Nenashev\*

Institute for Calculative Technologies,  
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

\* Rzhanov Institute of Physics of Semiconductors,  
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract** Strain distribution and electron potential profiles in Ge/Si structures with stacked quantum dots for realization of basic blocks of quantum computer are calculated. The conjugate gradients method and the Keating atomistic model were used. Calculations were made in the cluster approximation. The size of calculated clusters was about 3 millions atoms, positioned on 150 coordination spheres. The spatial distribution of strain was used for calculation potential energy of electrons in different valleys of Si conduction band. It was shown that many-layered stacked structures with quantum dots allow creating the deep potential wells for electrons with vertical tunnel coupling.