

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Hu, J. Nonsaturating magnetoresistance of inhomogeneous conductors: Comparison of experiment and simulation / J. Hu, M. M. Parish, T. F. Rosenbaum // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 75, № 21. – P. 214203 (1–10).
2. Control of graphene adhesion to substrate during transfer through liquid / V. A. Andryushchenko [et al.] // *Journal of Molecular Liquids.* – 2024. – V. 395, № 1. – P. 123827.
3. Raman spectra of epitaxial graphene on SiC and of epitaxial graphene transferred to SiO₂ / D. S. Lee [et al.] // *Nano letters.* – 2008. – Vol. 8. – №. 12. – P. 4320–4325.
4. Parish, M. Non-saturating magnetoresistance in heavily disordered semiconductors / M. Parish, P. Littlewood // *Nature.* – 2003. – Vol. 426. – P. 162-165.
5. Linear magnetoresistance in mosaic-like bilayer graphene / F. Kisslinger [et al.] // *Nature Phys.* – 2015. – Vol. 11. – P. 650–653.
6. Unconventional large linear magnetoresistance in Cu_{2-x}Te / A. A. Sirusi [et al.] // *AIP Adv.* – 2018. – Vol. 8, №.5. – P. 4320-4325 (1-5).
7. Mobility controlled linear magnetoresistance with 3D anisotropy in a layered graphene pallet / Q. Zhang [et al.] // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2016. – Vol. 49, №.42 – P. 425005 (1–9).
8. Weak localization and electron-electron interaction in percolating Nickel films / M. Aprili [et al.] // *Solid State Comm.* – 1997. – Vol. 102, № 1 – P. 41–46.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЕ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ХАТТРИ-ФОКА

Е. А. Левчук

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,
e-mail: liauchuk.alena@gmail.com*

Проведен расчет двухэлектронных состояний в системе пары доноров и электрически индуцированных квантовых точек, находящихся под действием внешнего однородного магнитного поля, с помощью метода Хаттри-Фока на основе вариационного метода. Рассматривались различные вариационные пробные функции для учета обменного взаимодействия. На основе сравнения с асимптотическим приближением для обменной энергии пары доноров, установлен оптимальный вид пробных функций, учитывающих влияние обменного взаимодействия. Получены зависимости обменной энергии электрически индуцированных квантовых точек от величины магнитного поля. Показано влияние фазового множителя для учета влияния магнитного поля на обменную энергию пары электрически индуцированных квантовых точек.

Ключевые слова: электрически индуцированная квантовая точка; обменная энергия; магнитное поле; метод Хаттри-Фока; вариационный метод.

NUMERICAL MODELING OF EXCHANGE INTERACTION IN TWO-ELECTRON SYSTEM USING THE HARTREE-FOCK METHOD

E. A. Levchuk

Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus
Corresponding author: E.A. Levchuk (liauchuk.alena@gmail.com)

Numerical calculation of two-electron states in system of two donors and electrically defined quantum dots under external uniform magnetic field is carried out using the Hartree-Fock method based on the variational method. Different variational trial functions for taking into account the exchange interaction have been considered. Based on comparison with the asymptotic approximation for the exchange energy of a donor pair, the optimal form of trial functions has been found. Dependences of the exchange energy of electrically induced quantum dots on magnetic field value have been obtained. The effect of phase factor for considering the magnetic field effect on the exchange energy of two electrically defined quantum dots has been shown.

Key words: electrically defined quantum dot; exchange energy; magnetic field; Hartree-Fock method; variational method.

ВВЕДЕНИЕ

Многие предполагаемые реализации твердотельного квантового компьютера требуют взаимодействия нескольких электронов соседних доноров или квантовых точек (КТ) для осуществления однокубитных и двухкубитных операций [1–2]. Ключевой характеристикой при этом является обменное взаимодействие двух электронов, связанных с парой доноров или квантовых точек. Управление обменной энергией может осуществляться с помощью внешнего магнитного поля [3–4]. Отдельной проблемой при изучении таких систем является выбор приближенного метода для решения многочастичного стационарного уравнения Шредингера. Наиболее простыми для использования являются методы Хайтлера-Лондона и Хунда-Мулликена [4–5], которые, однако, демонстрируют плохую сходимость при малых расстояниях между донорными центрами или квантовыми точками [5]. В данной работе используется метод Хартри-Фока и исследуется влияние пробных функций на точность расчета обменной энергии.

МОДЕЛЬ

Рассмотрим систему из двух электронов, находящихся в поле затворов A_1 и A_2 с центрами в точках $(R, 0, 0)$ и $(-R, 0, 0)$, формирующих электрически индуцированные квантовые точки, и двух донорных центров, расположенных в точках $(R, 0, z_0)$ и $(-R, 0, z_0)$ (рис. 1). Электроны находятся в области $z > 0$, заполненной полупроводником. На плоскости $z = 0$ находится бесконечно высокий потенциальный барьер (слой диэлектрика), препятствующий проникновению электронов в область $z < 0$. На электроны действует однородное магнитное поле, направленное перпендикулярно плоскости $z = 0$.

Обменную энергию можно рассчитать как половину разности энергий триплетного и синглетного состояний, полученных при решении двухчастичной задачи для стационарного уравнения Шредингера:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1)$$

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}^{(1)}(\vec{r}_1) + \hat{H}^{(1)}(\vec{r}_2) + \frac{2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad \hat{H}^{(1)}(\vec{r}) = T + \hat{V}_{D_1} + \hat{V}_{D_2}, \quad (2)$$

где T – одночастичный оператор кинетической энергии, \hat{V}_{D_i} – потенциалы квантовых точек или доноров, определяемые выражениями

$$\hat{V}_{D_i} = -\frac{2\Phi_0}{\pi} \operatorname{arctg} \left(\frac{d}{2} \sqrt{\frac{2}{r^2 + (r^4 + d^2 z^2)^{1/2}}} \right), \quad r^2 = (x \pm R/2)^2 + y^2 + z^2 - \frac{d^2}{4}, \quad i = 1, 2, \quad (3)$$

где d – диаметр затвора, и

$$\hat{V}_{D_i} = -\frac{2}{\sqrt{(x \pm R/2)^2 + y^2 + (z - z_0)^2}}, \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

соответственно.

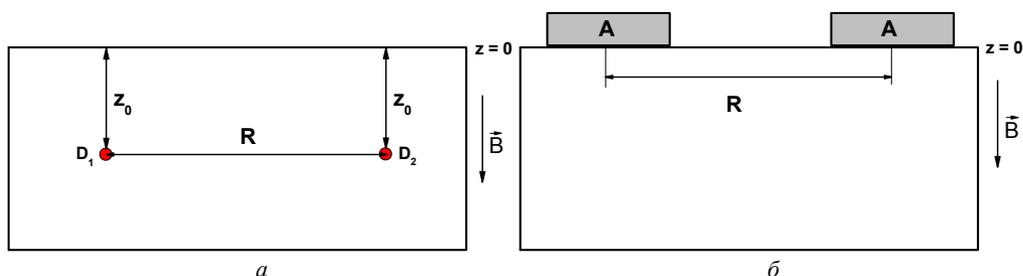


Рис. 1. Схемы изображения: *a* – пары доноров; *б* – пары электрически индуцированных квантовых точек вблизи поверхности полупроводника

Для решения задачи (1)–(4) использовался метод Хартри-Фока. Для вычисления обменных интегралов решалась задача для уравнения Пуассона, которая сводилась к двумерной задаче для уравнения Гельмгольца с помощью преобразования Фурье, а затем решалась методом конечных элементов. При решении уравнения Шредингера использовался вариационный метод с пробными функциями в виде комбинаций гауссиан и полиномов, аналогичные использованным в [6].

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Одной из проблем, возникающей при расчетах, является выбор пробных функций для решения уравнения Шредингера. Для описания волновой функции вблизи затворов (доноров) использовались пробные функции для одноэлектронной задачи, которые представляют собой комбинацию гауссиан и полиномов. Для учета обменной части рассматривались пробные функции различного вида. Во-первых, функции, аналогичные функциям для одночастичной задачи, но с центром, расположенным между доноров или квантовых точек (φ_i и χ_i , соответственно):

$$\varphi_i(x, y, z) = \exp(-\alpha_i x^2 - \beta_i y^2 - \gamma_i (z - z_0)^2), \quad \chi_i(x, y, z) = z \exp(-\alpha_i x^2 - \beta_i y^2 - \gamma_i z^2), \quad (5)$$

где $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ – параметры, равные аналогичным параметрам для одноэлектронных базисных функций. Во-вторых, рассматривались функции вида $x\varphi(x, y, z)$, (6)

где $\varphi(x, y, z)$ – одноэлектронные базисные функции. Для сравнения качества пробных функций использовалось приближенное асимптотическое выражение [7] для обменной энергии пары доноров: $J \approx 1.64R^{5/2} \exp(-2R)$. При сравнении влияния функций (5) и (6) рассматривались $N = 4$ набора параметров $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ для одночастичных базисных функций и $N = 5$ таких параметров. Для расстояний между донорами $R = 8a^*$ для $N = 4$ погрешность в обменной энергии составила $\sim 40\%$, при $N = 5$ – $\sim 20\%$. Такая разница в обменной энергии существенно больше разницы между энергиями основного состояния одноэлектронной задачи, вычисленными с помощью аналогичных пробных функций. Также расчеты показали, что использование функций (6) позволяет уменьшить погрешность.

Еще одним вопросом, возникающим при выборе пробных функций, является необходимость учета влияния магнитного поля. При расчете состояний нескольких частиц во внешнем магнитном поле нужно учитывать магнитный потенциал, для чего вводят фазовый множитель $\exp(\pm iyR\mu/8)$ [8], где μ – безразмерное значение магнитного поля. Влияние такого фазового множителя на результаты расчетов приведено на рис. 2. Так как обменная энергия значительно зависит от расстояния между квантовыми точками и донорами, то обменная энергия нормировалась на значение обменной энергии при нулевом магнитном поле $J(0)$. Как видно из рисунка, наличие фазового множителя не только существенно уменьшает значение обменной энергии, но и качественно изменяет характер зависимости.

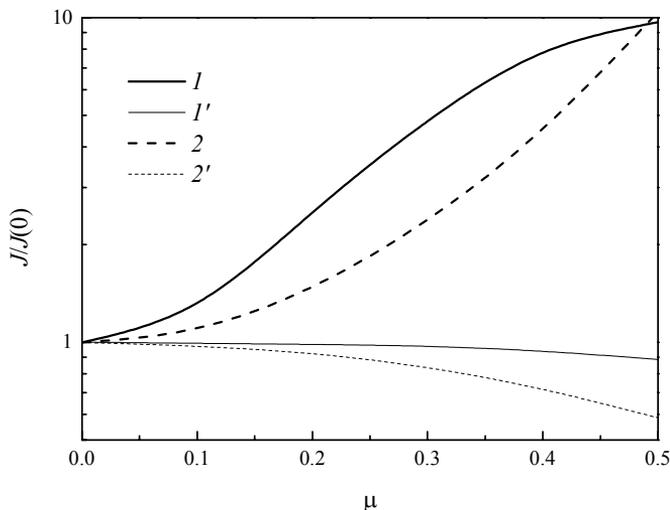


Рис. 2. Обменная энергия пары электрически индуцированных КТ в зависимости от магнитного поля; $1, 1' - R = 10a^*$; $2, 2' - R = 6a^*$; для кривых $1, 2$ использовались пробные функции без фазового множителя, $1', 2'$ – пробные функции с фазовым множителем

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе проведен расчет обменной энергии пары доноров и электрически индуцированных квантовых точек с помощью метода Хатри-Фока на основе вариационного метода. В результате сравнения различных пробных функций установлен оптимальный вид функций, учитывающих влияние обменного взаимодействия и магнитного поля.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Usman, M. Recent progress in atomistic modelling and simulations of donor spin qubits in silicon / M. Usman // Computational Materials Science. – 2021. – Vol. 193. – P. 110280.
2. Semiconductor spin qubits / G. Burkard [et al.] // Reviews of Modern Physics. – 2023. – Vol. 95, № 2. – P. 025003.
3. Baruffa, F. Spin-orbit coupling and anisotropic exchange in two-electron double quantum dots / F. Baruffa, P. Stano, J. Fabian // Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2010. – Vol. 82, № 4. – P. 045311.
4. Exchange coupling in silicon quantum dots: Theoretical considerations for quantum computation / Q. Li [et al.] // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 81, № 8. – P. 085313.
5. Calderon, M.J. Exchange coupling in semiconductor nanostructures: Validity and limitations of the Heitler-London approach / M.J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2006. – Vol. 74, № 4. – P. 045310.
6. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G.D.J. Smit [et al.] // Physical Review B. – 2003. – Vol. 68. – P. 193302.
7. Fang, A. Effect of J-gate potential and uniform electric field on a coupled donor pair in Si for quantum computing / A. Fang, Y.C. Chang // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 155331.
8. 3D two-electron double quantum dot: Comparison between the behaviour of some physical quantities under two different confinement potentials in the presence of a magnetic field / A.M. Maniero [et al.] // Physica B: Condensed Matter. – 2023. – Vol. 657. – P. 414818.

КРЕМНИЕВЫЙ ТЕРМООПТИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕРОМЕТР ПО СХЕМЕ МАХА-ЦЕНДЕРА: КОНСТРУКЦИЯ И ДИЗАЙН УСТРОЙСТВА

Г. А. Лемешевская¹, А. А. Скрылев¹, А. В. Нежданов¹, К. В. Сидоренко¹,
А. И. Бобров¹, Д. Е. Николичев¹

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского Россия,
603022 Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
e-mail: lemeshevskaya@unn.ru*

Создана математическая модель термооптического интерферометра Маха-Цендера, выполненного по технологии «кремний на изоляторе». Модель позволяет прогнозировать распределение тепла в субмикронной структуре при её нагреве, а также связанное с этим изменение оптических характеристик исследуемой микро-системы. Проведено сравнение расчетных результатов с экспериментальными данными. Результаты анализа позволили найти калибровочный коэффициент для математической модели, с использованием которых возможно достоверно прогнозировать поведение схожих планарных оптических систем, работающих на термооптическом эффекте. При этом в расчётах могут варьироваться параметры активной области: её материал, форма и топология.

Ключевые слова: кремниевая фотоника; термооптический эффект; интерферометр Маха-Цендера; кремний на изоляторе.