# Элементы квантового компьютера из отдельных примесных атомов в кремнии



Т.В. Павлова

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва НИУ «Высшая школа экономики», Москва

# Silicon gains ground in quantum-computing race

Slow-starter seeks to catch up with rival techniques.

Nature 553, 136 (2018)



Silicon Quantum Computing Pty Ltd (US\$65 million) Centre for Quantum Computation and Communication Technology (Michelle Simmons at the University of New South Wales)









инвесторы



Intel (US\$50 million over 10 years at TU Delft) L. M. K. Vandersypen at TU Delft



IBM (Zurich) – silicon quantum dots

# Схема квантового компьютера на ядерных спинах <sup>31</sup>Р в <sup>28</sup>Si



B.E. Kane, A silicon-based nuclear spin quantum computer, Nature 393, 133 (1998)

Отдел технологий и измерений атомного масштаба

Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН



# Электронный и ядерный спин донора Р в магнитном поле

Спиновый электрон-ядерный гамильтониан для донорного атома:

$$\widehat{H} = 2\mu_{\rm B} \mathbf{B} \widehat{\mathbf{S}} - g_{\rm N} \mu_{\rm N} \mathbf{B} \widehat{\mathbf{I}} + A(\widehat{\mathbf{I}} \widehat{\mathbf{S}}), \quad A = \frac{2\mu_0}{3} 2\mu_{\rm B} g_{\rm N} \mu_{\rm N} |\Psi_0(0)|^2$$
  
Спин электрона Спин ядра постоянная сверхтонкого взаимодействия

Гамильтониан для двух донорных Р атомов:

$$\widehat{H} = 2\mu_{\rm B} \mathbf{B}(\widehat{\mathbf{S}}_{\rm a} + \widehat{\mathbf{S}}_{\rm b}) + J(\widehat{\mathbf{S}}_{\rm a}\widehat{\mathbf{S}}_{\rm b}) + \Delta\widehat{H}$$

обменное взаимодействие

$$\Delta \widehat{H} = \widehat{H}_{\mathbf{a}} + \widehat{H}_{\mathbf{b}} = -g_{\mathbf{N}}\mu_{\mathbf{N}}B(\widehat{I}_{\mathbf{az}} + \widehat{I}_{\mathbf{bz}}) + A_{\mathbf{a}}(\widehat{\mathbf{I}}_{\mathbf{a}}\widehat{\mathbf{S}}_{\mathbf{a}}) + A_{\mathbf{b}}(\widehat{\mathbf{I}}_{\mathbf{b}}\widehat{\mathbf{S}}_{\mathbf{b}})$$

постоянная обменного взаимодействия (без учета зонной структуры Si):

$$J(l) \cong 1, 6 \cdot \frac{q^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 a_t} \cdot (l/a_t)^{5/2} \exp(-2l/a_t)$$



# Управление кубитами в модели Кейна



# Считывание спина электрона через одноэлектронный транзистор (и инициализация)



### Схема квантового компьютера на ядерных спинах <sup>31</sup>Р в <sup>28</sup>Si



# Основные технологические трудности связаны с точным размещением Р



B.E. Kane, A silicon-based nuclear spin quantum computer, Nature 393, 133 (1998)

Отдел технологий и измерений атомного масштаба

Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН



#### Ионная имплантация фосфора в кремний (подход «сверху вниз»)



Andresen at al., in Electron Spin Resonance and Related Phenomena in Low-Dimensional Structures, Springer (2009).

8

	Department of Technologies and Measurements on Atomic Scale
	Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences



Реализация на основе имплантации <sup>31</sup>Р в <sup>28</sup>Si (кубит - электронный спин)



J.J. Pla, ...A. Morello. Nature 489, 541 (2012)



# Реализация однокубитового устройства (ионная имплантация)



#### CENTRE FOR QUANTUM COMPUTATION & COMMUNICATION TECHNOLOGY

AUSTRALIAN RESEARCH COUNCIL CENTRE OF EXCELLENCE

Nature Nanotechnology **9**, 986 (2014) группа проф. А. Морелло Ядерный спин: время когеренции 30 с, точность контроля 99.99%. Электронный спин: время когеренции 0.5 с.



Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН



# Реализация двухкубитового устройства (ионная имплантация)



Точность имплантации: 6-15 nm. Слишком грубый метод для реализации схемы Кейна.

J. Phys.: Condens. Matt. 27, 154204 (2015)

David N. Jamieson, Single-Ion Implantation for Quantum Computing, in Single-atom nanoelectronics, 2013.



Si

Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН

11



### Реконструкция поверхности кремния Si(100)-2x1

#### реконструированная поверхность с димерами

#### идеальная поверхность (невыгодна)



Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences

12

National Research University Higher School of Economics

#### СТМ-литография по резисту из монослоя водорода на Si(100)

b, Surface preparation



d, Phosphine dosing



e, Dopant incorporation



f, Silicon overgrowth



M. Fuechsle, M.Y. Simmons, Using Scanning Tunneling Microscopy to Realize Atomic-Scale Silicon Devices, in Singleatom nanoelectronics, 2013.





Создание маски (удаление атомов водорода) LEESD (low kinetic energy electron stimulated desorption, 150 eV)



#### Диссоциация фосфина на Si(100)



Если PH<sub>3</sub> диссоциирует не полностью, то при нагреве десорбируется.

Проблема: для диссоциации PH<sub>3</sub> нужно 6 свободных атомов Si, поэтому точность встраивания составляет около 10 Å.

J. Chem. Phys. 144, 014705 (2016)



Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН



# Осцилляции обменного взаимодействия между двумя Р в Si





Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН

ß

#### Реализация на основе СТМ-литографии (1Р + 2Р)



17

#### Wang, Y. et al. Npj Quantum Inf. 2, 16008 (2016).

#### Обменное взаимодействие не осциллирует

Department of Technologies and Measurements on Atomic Scale Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences

Joint Department of Quantum Technologies with GPI RAS

B

# Реализация двухкубитового устройства (СТМ-литография)



A-D: СТМ-изображения маски из монослоя водорода на Si(100)-2x1

Спины электронов: время когеренции 30 с, точность считывания значений спина: 99,8% (достаточна для surface code). Science Advances 3, e1602811 (2017) – кв. точки 2Р и 3Р

Обменное взаимодействие между кв. точками 1Р и 2Р менее чувствительно к точности размещения атомов Р, но сложнее использовать ядерный спин.





# Предполагаемая архитектура (2015 г.)



Sci. Adv. 1, e1500707 (2015)







1. СТМ-литография на Si(100)-2x1-Cl с удалением атома кремния

2. Адсорбция PH<sub>3</sub>

3. Эпитаксия кремния





#### Краудионы (дефекты внедрения) на поверхности Si(100)-2x1-Cl



После STM импульса





теор. СТМ





теор. СТМ

Такие состояния были предсказаны давно, но в СТМ не наблюдались.



вид сверху

Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН

21

вид сбоку

Кафедра квантовых технологий Физического факультета НИУ ВШЭ



#### Разрушение краудиона под действием иглы СТМ



После STM импульса





Используются более мягкие параметры воздействия чем при создании глубоких ямок. Предварительно считаем что удаляем SiCl<sub>2</sub>.





### Перемещение краудиона под действием иглы СТМ



Последовательно записанные СТМ-изображения





Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН



# Перемещение краудиона под действием иглы СТМ

 $U_s < 0$ 

#### Последовательно записанные СТМ-изображения



Создание краудиона + вакансии



Можно передвигать краудион, сканируя при разных напряжениях вдоль определенного направления.









Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН



#### Адсорбция фосфина (PH<sub>3</sub>) на поверхность Si(100)-2x1-CI с дефектами и без



#### Проверка: определение точного положения примеси



# Научные задачи в области квантовых вычислений

Основной задачей является создание экспериментального образца, состоящего из одно- и двухкубитового квантовых регистров на основе атомов и/или кластеров <sup>31</sup>Р и одноэлектронного транзистора на поверхности моноизотопного кремния <sup>28</sup>Si.











#### Компьютерное моделирование, «численный эксперимент»









# Si эпитаксия на Si(100)-2x1-Cl

Проведены ТФП-расчеты адсорбции атома кремния на поверхность Si(100)-2x1-Cl

Наиболее выгодные структуры при адсорбции Si на Si(100)-2x1-Cl:







# Si эпитаксия на Si(100)-2x1-Cl

Проведены ТФП-расчеты адсорбции атома кремния на поверхность Si(100)-2x1-Cl

Наиболее выгодные структуры при адсорбции Si на Si(100)-2x1-Cl:









#### Выводы:

При адсорбции Si атомы хлора сегрегируют на поверхность или слетают в виде SiCl<sub>2</sub>.

Можно проводить эпитаксию Si на Si(100)-2x1-Cl не удаляя Cl.



Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН



#### Компьютерное моделирование, «численный эксперимент»

#### Колебания атомов



#### Распределение электронной плотности



Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН

#### Плотность энергетических состояний



#### Теоретическое СТМ-изображение



Кафедра квантовых технологий Физического факультета НИУ ВШЭ



# Сайт отдела ТИАМ:

# tmas-gpi.ru

(исследования, публикации, вакансии...)

# Спасибо за внимание



Отдел технологий и измерений атомного масштаба Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН

