

*Жуков Николай Дмитриевич,
кандидат физико – математических наук. Научный сотрудник НТЦ
«Микроэлектроника» Саратовского исследовательского государственного
университета*

КВАНТОВОРАЗМЕРНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ (КВАДИМЕЛЫ) ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ И КОММУНИКАЦИЙ

***Аннотация.** Анализируется возможность использования квантоворазмерных нанокристаллов как элементной базы нанoeлектроники для процессоров квантовых вычислений и коммуникаций. Один нанокристалл может обладать свойством 20-кубитного элемента. Рассмотрены примеры использования нанокристаллов как элементов мемристорной памяти и нанофотоники.*

***Ключевые слова.** Квантоворазмерный нанокристалл, квадимел, квантовый транспорт, квантовый резонанс, квантовая информатика, кубит, мемристор.*

***Annotation.** The possibility of using quantum-dimensional nanocrystals as a component base for nanoelectronics in quantum computing and communications processors is analyzed. A single nanocrystal may possess the properties of a 20-qubit element. Examples of using nanocrystals as elements in memristor memory and nanophotonics are considered.*

***Keywords.** Quantum-sized nanocrystal, quaddimel, quantum transport, quantum resonance, quantum information science, qubit, memristor.*

Введение.

Важным направлением современной науки и техники является переход

от цифровой информатики к квантовой. На замену обычным компьютерам и битам приходят квантовые компьютеры и кубиты. Цифровая информатика базируется на кремниевой микроэлектронике. Элементная база квантовой информатики (квантроники) пока проходит путь становления, ещё находясь в стенах лабораторий.

Для реальных приборных структур квантроники сегодня используется квантовое свойство электрона – спин и спин-орбитальное взаимодействие в атоме, молекуле, квантовой точке. Однако, этот метод приводит к необходимости сверхглубокого охлаждения (<1 К) и использования «неудобных» способов управления электронными состояниями и измерений их параметров, что создаёт большие технические и финансовые проблемы в исследованиях и промышленном масштабировании.

Электрон в атоме, молекуле, квантовой точке рассматривается как квантовая частица, движение которой описывается решениями уравнения Шрёдингера в сферических координатах, а его квантовые состояния моделируются на сфере Блоха. Хорошо отработанная схема для спина электрона в атоме допускает произвольное вращение на сфере из начального состояния в целевое с разложением на последовательные вращения вокруг сферических осей [1]. Для описания состояний электрона в молекуле может быть использован развитый метод молекулярных орбиталей, когда состояние электрона описывается одноэлектронной волновой функцией, являющейся решением уравнения Шрёдингера и удовлетворяющей условиям нормировки [2]. Каждая орбиталь характеризуется своим набором квантовых чисел.

Спин электрона в атоме и молекуле представляется как магнитный момент, обусловленный принципиально его собственным и орбитальным вращениями. При этом «правое» и «левое» вращения создают два независимых направления спина, используемые как кубит. Происходящие постоянно изменения направления спина обусловлены спин-орбитальными взаимодействиями. Устойчивое состояние электрона на орбитали является

когерентным, полезным с точки зрения квантовых процессов. Момент неизбежного перехода электрона из одного в другое устойчивое состояние является декогеренцией, то есть нарушением полезного когерентного состояния. При этом электрон испытывает и другие, более существенные, декогерентные влияния, обусловленные межзарядовыми взаимодействиями и любыми локальными флуктуациями в сложной системе атома и молекулы, влияниями внешних электромагнитных излучений. Все эти паразитные влияния значительно блокируются за счёт сверхглубокого охлаждения и специальных конструкторских приёмов, что, однако, создаёт большие проблемы для разработок и применений устройств квантовых вычислений и коммуникаций.

В любом варианте квантового объекта уравнение Шрёдингера имеет множество частных решений, отбор из которых определяется граничными условиями, то есть физическими и геометрическими свойствами этого объекта. В спиновых вариантах атомов и молекул их границы, как квантового объекта, виртуальны, то есть, не определены жёстко. Это, с одной стороны, создаёт неопределённость граничных условий, а, с другой, не блокирует некоторые влияющие воздействия на электрон. Это обстоятельство, собственно, и является определяющим для потерь свойств, которые приходится купировать суперохлаждением.

В таком рассмотрении физические свойства квантового объекта, как квантоворазмерного элемента, имеют для процесса движения в нём электрона принципиальное значение. Вполне логично предложить рассматривать его наравне с атомом и молекулой, обозначив, например, как квадимел, *quadimel* (QDE), от – *quantum-dimensional element*. При таком подходе можно считать, что квадимелы определяют квантовые свойства материи. Причём к ним можно отнести и атом с молекулой, в которых переходы между орбиталями имеют и пространственный (размерный) характер. Фактически, квадимел – большая

молекула (сотни атомов) с тем специфическим свойством, что в ней возможно квантуемое движение квазисвободного электрона.

Квадимел, таким образом, приводит хаотический квантовомеханический процесс изменений состояний электрона в некий закономерный порядок, обусловленный отбором состояний благодаря их размерному квантованию. Принципиальным при этом является определение условий размерного квантования и квантовой размерности – установившийся (стационарный) процесс квантового электронного транспорта, обеспечиваемый тем, что квантоворазмерный элемент должен действовать как электронный квантовый резонатор. Практически эти условия должна обеспечить наноструктура рабочего элемента.

Квадимелы – квантоворазмерные полупроводниковые нанокристаллы

В качестве квадимелов, как пример широкого практического использования, можно рассматривать квантоворазмерные нанокристаллы бинарных полупроводников с высокими параметрами размерного квантования. В случаях возбуждения неравновесных носителей необходимо энергетическое представление длины волны де Бройля для них, которое для случая квадратичной дисперсии имеет выражение $\Lambda = h(2mE_c)^{-1/2}$, где m – эффективная масса, а E_c – кинетическая энергия электрона. Практически во всех случаях полупроводниковых наночастиц совершенной кристаллической структуры их проводимость является собственной. Для собственного полупроводника максимальное значение кинетической энергии неравновесного термализованного носителя заряда равно уровню энергии Ферми, которую можно принять как половину ширины запрещённой зоны полупроводника E_g – $\Lambda_0 = h(mE_g)^{-1/2} \sim 1.6(E_g m/m_0)^{-1/2}$ нм, где E_g в электронвольтах. Минимальные рассчитанные значения длины волны де Бройля для электрона в собственных полупроводниках, наиболее используемых как материалы квантовых точек, следующие: InSb – 30 нм; PbS

– 9 нм; InAs – 6 нм; GaAs – 5 нм; CdTe – 3 нм; CdSe – 3 нм; Si – 2 нм. Наилучшие параметры размерного квантования, таким образом, имеют узкозонные полупроводники и, прежде всего, антимонид индия.

Схема модельного построения процессов квантового электронного транспорта в нанокристаллах полупроводников выглядит следующим образом.

Решается стационарное одномерное уравнение Шрёдингера относительно волновой функции Ψ и её собственных значений энергии E в граничных условиях нанокристалла (квадимера), вычисляется коэффициент прохождения D квантовой волны через квантовую яму прямоугольной формы в условиях соотношения энергии электрона E и потенциальной энергии квантовой ямы $U - E < U$. Считается, что поток электронов J через нанокристалл пропорционален D . Рассчитывается дифференциальная проводимость dJ/dE и определяются условия её максимума (резонанса). Подтверждение модели проводится сопоставлениями с результатами измерений.

Для расчёта коэффициента прохождения D используется понятие величины вектора плотности потока вероятности [3]: $j = i\hbar(2m)^{-1}(\Psi\Psi^* - \Psi^*\Psi')$. Коэффициент прозрачности определяется как отношение выходящего j_2 и входящего j_1 потоков через потенциальный барьер: $D = \lim_{x \rightarrow \infty} (|j_2|/|j_1|)$. Все решения и вычисления приводят к выражениям для квантовой проводимости электронного транспорта:

$$\begin{aligned} G &= J_0 dD/dV = J[1.5\hbar^{-1}m^{1/2}a_n(V-E)^{-1/2}], \text{ или } - \\ G_R &= G/J = 1.5\hbar^{-1}m^{1/2}a_n(V-E)^{-1/2} \approx 6(m/m_0)^{1/2}a_n(V-E)^{-1/2}, \text{ или } - \\ (G_R)^{-2} &= (1/36)(m/m_0)^{-1}a_n^{-2}(V-E) \end{aligned} \quad (1)$$

Квантовая проводимость проявляется как квантовый резонанс, определяемый условием $(E \rightarrow V)$. С учётом решения уравнения Шрёдингера для собственной функции – $E_q = q^2\hbar^2(8ma_n^2)^{-1}$, где q - квантовое число,

получится следующее выражение для зависимости от точки напряжения резонанса V_R :

$$q^2 \approx V_R h^{-2} (8ma_n^2) \approx 2.7V_R a_n^2 m/m_0 \quad (2)$$

При вычислениях везде: энергия – в вольтах, размеры – в нанометрах.

На рисунке 1, **a** представлен типичный пример наших измерений квантовой проводимости G и результаты вычислений a_n по формуле (2).

На рис. 1, **b** приведены результаты экспериментов (точки и сплошные линии тренда), вычислений и построений по формуле (1).

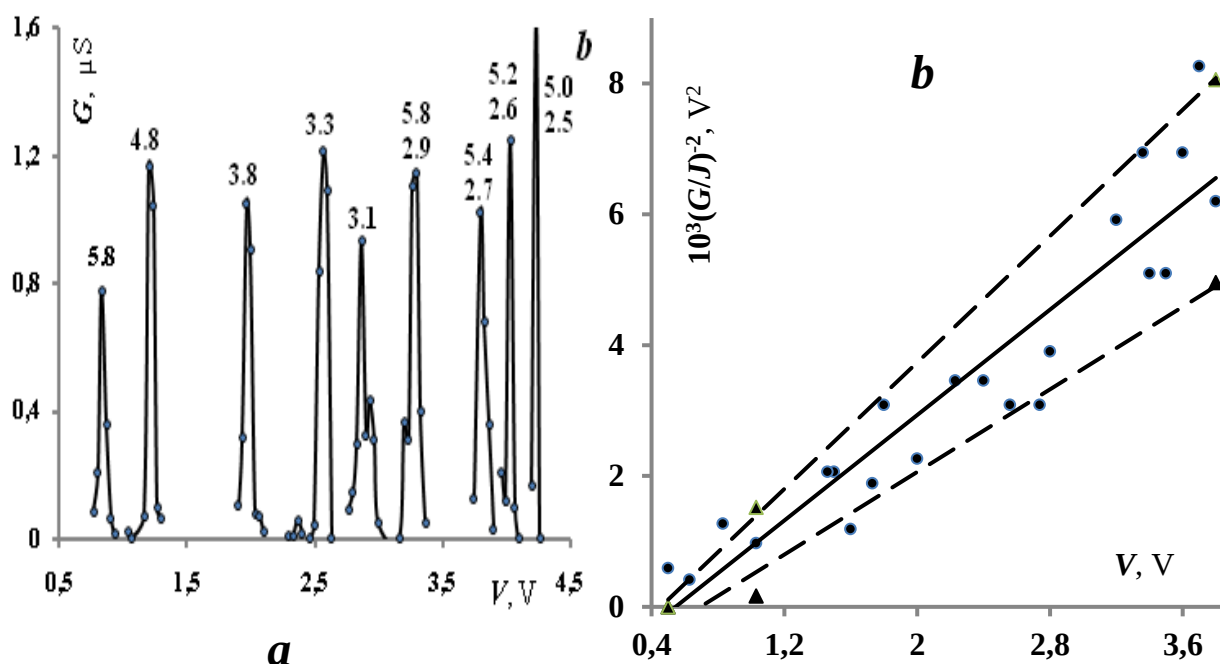


Рисунок 1. а: пики проводимости NC-InSb, цифры над кривыми – вычисленные значения размеров a_n для случаев $q=1$ (одионые и нижние) и $q=2$ (верхние) б: зависимости $(G/J)^{-2} \sim V$ для NC-PbS. Штриховые линии – границы коридора отклонений

На рисунках приведены линии тренда для точек значений $(G_R)^{-2}$ и построены расчётные конусные коридоры отклонений. Коридоры строились так, чтобы член с параметром E был одинаков для всех трёх линий тренда, а отклонения значений были в 2 раза больше разброса измеренных размеров $a_{\text{пизм}}$ нанокристаллов – $\pm 15\%$ для NC-InSb и $\pm 10\%$ для NC-PbS. Для образцов

с точками в коридоре хорошо выполняется условие $2\beta a_n > 1$ и соответствие формуле (1).

Квадимелы и кубиты

Как и бит, кубит допускает два собственных состояния (нуля и единицы), обозначаемых $|0\rangle$ и $|1\rangle$, но при этом может находиться в их суперпозиции. В общем случае его суперпозиция имеет вид $(A|0\rangle + B|1\rangle)$, где A и B являются комплексными амплитудами вероятности и удовлетворяют условию $|A|^2 + |B|^2 = 1$ [4].

Число кубитов находится как сочетания по два из общего числа независимых параметров – степеней свободы. В рассматриваемом нами случае квадимелов можно принять, что у его квазисвободного электрона при квантовом транспорте в нём может быть, по меньшей мере, 7 степеней свободы: три – по координате, две – по спину, две – по квантовому числу. Это даёт 21 кубит. То есть, такой квадимел действует как 21-кубитный вычислитель.

Однофотонные излучатель и регистратор

В квантоворазмерном нанокристалле, как электронном нанорезонаторе, происходят осцилляции заряда. Такой квантовый осциллятор излучает пофотонно в дальнеинфракрасном и терагерцевом спектрах. В таком же нанокристалле под действием излучения происходит электронный «разогрев», обуславливающий изменение положения резонансного пика на вольтамперной характеристике. Эффект проявляется как фотонный болометр. Кроме ультравысокого (пикосекундного) быстродействия излучение такой оптопары параметрировано, и можно ожидать, что она не будет реагировать на внешние сторонние воздействия, что важно для защиты от паразитных влияний [5].

Элемент памяти – электронный мемристор

Мемристорный эффект заключается в изменении под действием напряжения и сохранении после его снятия сопротивления элемента [6]. По

современному состоянию технологических работ в этом направлении используются наноразмерные оксидные материалы, изменяющие свою структуру и, соответственно, сопротивление под действием напряжения. При таком способе быстродействие элемента не будет высоким. Полупроводниковый нанокристалл (НС) в своём исходном состоянии не проводит и становится проводящим, если инжектировать в него электрон, который, однако, под действием поля туннелирует из него через некоторое ультракороткое время его резонансного движения в НС. Если этим временем ограничить воздействие напряжением, то электрон останется в НС как в глубокой протяжённой потенциальной яме. Нанокристалл будет заряжен электроном, и это состояние сохранится, пока не будет приложен импульс напряжения большей, чем при записи, длительности. Такой мемристор можно назвать электронным.

Таким образом, в качестве квадимелов предложены полупроводниковые квантоворазмерные нанокристаллы, которые могут быть использованы как элементы устройств квантовых вычислений и коммуникаций на конструкторско-технологических принципах микроэлектроники, в частности, для решения фундаментальной проблемы криптографии в стационарных и, в особенности, мобильных системах квантовых коммуникаций.

Список литературы:

1. X. Zhang et. al. Semiconductor quantum computation. National Science Review 6: 32–54, 2019. doi: 10.1093/nsr/nwy153.
2. Жуков Н. Д., Клецов А. А., Мосияш Д. С., Беляев В. В. Моделирование атомных конфигураций нанокристаллов на стадии зародышеобразования. Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024/№2. SSN 2949-5083. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-2-6-18

3. В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин, *Основы наноэлектроники*. Логос, М., 2006. 495 с.

4. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. Изд-во М:МИР. 2006. 824 с.

5. Патент 2825716 «Однофотонный квантовый болометр». Приоритет 15.12.2023. Автор и заявитель – Жуков Н.Д. Патентообладатель – ООО «Империиус Групп».

6. Патент RU 2823967 «Одноэлектронный мемристор (наночейка) и способ применения» Приоритет 28.11.2023. Автор и заявитель – Жуков Н.Д. Патентообладатель – ООО «Империиус Групп».