

Краткое сообщение

УДК 537.9:004.94

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18202>

## **ВЛИЯНИЕ ДЫРОЧНЫХ СОСТОЯНИЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ И ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХМЕРНЫХ СЛОЕВ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ КРЕМНИЙ-ГЕРМАНИЙ-КРЕМНИЙ**

**К. В. Образцов**<sup>1,2</sup> , **А. Н. Чибисов**<sup>2</sup>, **М. В. Мамонова**<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск, Россия;

<sup>2</sup> Вычислительный центр Дальневосточного отделения РАН, г. Хабаровск, Россия;

<sup>3</sup> Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского, г. Омск, Россия

 2018102293@pnu.edu.ru

**Аннотация.** В работе рассматривается поведение дырочного кубита в гетероструктуре Si/Ge/Si. С этой целью проведено квантовомеханическое исследование с применением теории функционала плотности и метода псевдопотенциала. Для элементарной структуры были построены зонная структура и график плотности электронных состояний. Установлено, что основная часть этих состояний локализована в диапазоне энергий от  $-2$  до  $-4$  эВ. Для построенной суперъячейки была рассчитана работа выхода и выполнена оценка вклада электронной дырки в электростатический потенциал системы. Анализ полученных результатов показал, что изменение работы выхода в системе связано со смещением уровня энергетического вакуума.

**Ключевые слова:** кремний, германий, теория функционала плотности, двухмерный слой, работа выхода, гетероструктура

**Финансирование:** Исследования атомной и электронной структуры выполнены в соответствии с Государственным заданием Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FEME-2024-0005). Расчеты работы выхода и электростатического потенциала были выполнены в рамках проекта Российского научного фонда № 24-13-20024.

**Для цитирования:** Образцов К. В., Чибисов А. Н., Мамонова М. В. Влияние дырочных состояний на электронные и электростатические свойства двухмерных слоев на основе гетероструктуры кремний-германий-кремний // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 2. С. 22–29. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18202>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Brief communication

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18202>

## **THE INFLUENCE OF HOLE STATES ON THE ELECTRONIC AND ELECTROSTATIC PROPERTIES OF 2D LAYERS BASED ON THE SILICON-GERMANIUM-SILICON HETEROSTRUCTURE**

**K. V. Obrazcov**<sup>1,2</sup> , **A. N. Chibisov**<sup>2</sup>, **M. V. Mamonova**<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Pacific National University, Khabarovsk, Russia;

<sup>2</sup> Computing Center of the Far Eastern Branch of the RAS, Khabarovsk, Russia;

<sup>3</sup> Omsk State University named after Dostoevsky, Omsk, Russia

 2018102293@pnu.edu.ru

**Abstract.** The performance of a hole qubit in the Si/Ge/Si heterostructure is considered in this work. For this purpose, a quantum mechanical study using density functional theory and the pseudopotential method has been carried out. The zone structure and density of electronic states were constructed for the elementary structure. It was found that the bulk of these states are localized in the energy range from  $-2$  to  $-4$  eV. For the constructed supercell the yield work was calculated and the contribution of electron hole to the electrostatic potential of the system was evaluated. The analysis of the obtained results showed that the change of the yield work in the system is associated with the shift of the energy vacuum level.

**Keywords:** silicon, germanium, density functional theory, two-dimensional layer, work function, heterostructure

**Funding:** The reported studies of atomic and electronic structure were carried out within the framework of the State Assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project FEME-2024-0005). The calculations of the work function and electrostatic potential were carried out within the framework of the Russian Science Foundation Project No. 24-13-20024.

**For citation:** Obrazcov K. V., Chibisov A. N., Mamonova M. V., The influence of hole states on the electronic and electrostatic properties of 2D layers based on the silicon-germanium-silicon heterostructure, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (2) (2025) 22–29. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18202>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

В настоящее время проблема создания квантового вычислителя является приоритетной задачей для современной микроэлектроники. Квантовые вычислители – это устройства, основанные на принципах квантовой механики, которые используют квантовые биты (или кубиты) для обработки информации. В отличие от классических битов в обычных компьютерах, которые способны принимать только одно из состояний (0 или 1), кубиты могут находиться в суперпозиции нескольких состояний одновременно [1, 2], что позволяет квантовым компьютерам выполнять вычисления на порядки быстрее и эффективнее. Они могут использоваться для решения сложных математических задач, криптографии, оптимизации, моделирования молекулярных и химических процессов, исследований искусственного интеллекта и во многих других областях. Создание квантовых компьютеров обещает преобразовывать способы обработки информации, открывая новые возможности для инноваций и научных открытий [3 – 5]. На сегодняшний день существует множество реализаций квантовых процессоров. Однако наиболее популярны кубиты на основе фотонов и сверхпроводниковые кубиты.

В настоящей статье мы рассматриваем дырку в качестве кубита. Основным преимуществом дырочного кубита выступает его сильное спин-орбитальное взаимодействие и возможность образовывать сверхпроводящие парные корреляции. Именно эти свойства дырок крайне важны для быстрого управления дырочными кубитами [6, 7]. Возможными материалами для создания подобного вычислителя могут послужить двухмерная аллотропная модификация кремния (силицен) или германия (германен) с использованием дырочного кубита [8, 9].

Для указанной цели в данной работе мы решили рассмотреть интерфейс Si/Ge/Si. Эта структура обладает уникальными электромагнитными свойствами благодаря различию кристаллических решеток кремния и германия [10]. В этом случае, ввиду низкой эффективной массы дырок [11, 12], можно получать кубит с большим временем отклика и удобной возможностью управлять его состоянием с помощью внешнего магнитного поля. Сама же структура при этом обладает отличной совместимостью с существующей микроэлектронной компонентой базой [13], и ее легко внедрить в существующее электронное производство.

Цель нашей работы заключалась в квантовомеханическом исследовании поведения дырочного кубита в двумерном слое кремний-германий-кремний (Si/Ge/Si) с использованием теории функционала плотности в рамках неколлинеарной намагниченности.

### Методы исследования

Расчеты характеристик структур проводились с помощью пакета программ VASP [14 – 16], основанном на теории функционала плотности и методе псевдопотенциала. Были проведены неколлинеарные расчеты с учетом спин-орбитальной связи и дополнительными поправками в обобщенном градиентном приближении (Generalized Gradient Approximation), (GGA + U)-подходе [17]. Для расчета магнитных и электронных свойств сначала для каждого атома устанавливался начальный магнитный момент, затем проводилась полная релаксация системы с учетом обобщенной теории локальной спиновой плотности, а результирующая намагниченность на атомах определялась с учетом полученных результатов. Использовался плосковолновой базис функций с энергией обрезания, равной 450 эВ. Для элементарных ячеек использовалась сетка  $k$ -точек  $18 \times 18 \times 1$ . Для увеличенной ячейки использовалась сетка  $k$ -точек  $6 \times 6 \times 1$ , построенная по схеме Монхорста – Пака [18].

### Результаты и их обсуждение

Исследование атомной и электронной структуры двумерного интерфейса Si/Ge/Si на первом этапе было направлено на рассмотрение одиночных структур силицена и германена. На первом этапе мы провели полную релаксацию атомных структур силицена и германена для нахождения минимума сил и полной электронной энергии для исследуемых систем. Релаксация структуры проводилась с сохранением симметрии ячейки, при этом процедура выполнялась над параметрами ячейки и координатами атомов.

На втором этапе мы строили атомную структуру двумерного интерфейса Si/Ge/Si. Она создавалась в виде сэндвича, в котором слой германена должен был быть расположен между двумя слоями силицена. На третьем и дальнейших этапах была произведена полная атомная релаксация созданной структуры по такому же принципу, как это уже было выполнено отдельно для силицена и германена.

С помощью программного пакета VASPKIT для постобработки полученных данных, для исследуемого интерфейса были рассчитаны плотность состояний и зонная структура. Расчеты производились с числом  $k$ -точек, равным 20. Для наглядности плотность состояний была сопоставлена с зонной структурой исследуемого материала (рис. 1).

Анализ данных на рис. 1 позволяет заключить, что наибольшие по энергии состояния локализованы в диапазоне от  $-2$  до  $-4$  эВ. Полученная зонная структура внешне сильно напоминает индивидуальные зонные структуры силицена и германена. Это говорит о

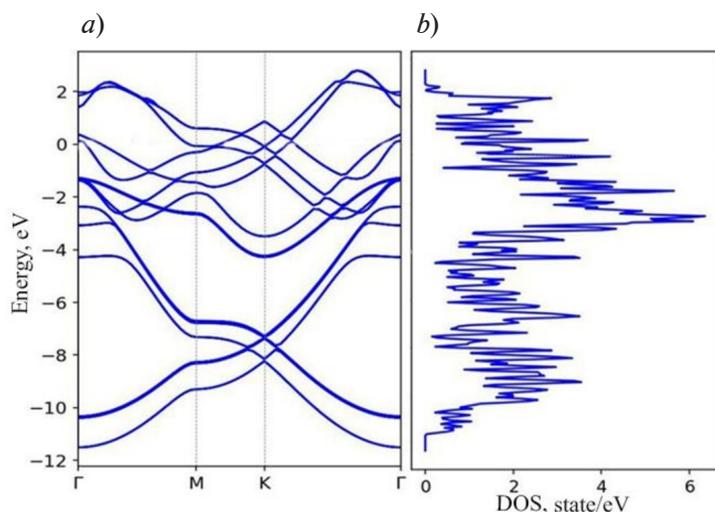


Рис. 1. Построенные зонная структура (a) и плотность состояний (b) интерфейса Si/Ge/Si

появлении новых энергетических уровней в результате наложения двух структур, а это в свою очередь вызывает образование интерфейсных состояний на границах раздела структур кремния и германия.

Для дальнейшего исследования электронных и магнитных свойств выбранной системы было необходимо увеличить исходную систему. Для этого мы транслировали исходную ячейку интерфейса с трехкратным увеличением параметров  $a$  и  $b$ . В результате сформировалась суперъячейка со следующими структурными параметрами:  $a = 11,421 \text{ \AA}$ ,  $b = 11,421 \text{ \AA}$ ,  $c = 25,166 \text{ \AA}$ . Параметр  $c$  был

выбран равным  $25,166 \text{ \AA}$ , с тем чтобы исключить влияние взаимодействия между транслируемыми слоями. Межатомное расстояние в слое силицена Si – Si соответствовало значению  $2,260 \text{ \AA}$ , а расстояние Ge – Ge в слое германена составило  $2,486 \text{ \AA}$ . При этом расстояние между слоями было равно  $3,647 \text{ \AA}$ . Полученная суперъячейка состояла в общей сложности из 54 атомов (рис. 2).

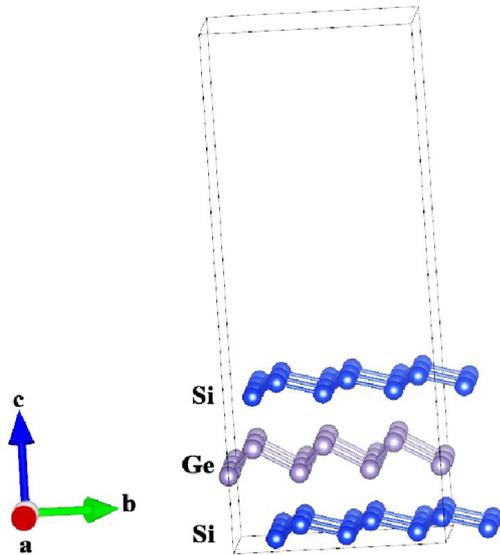


Рис. 2. Изображение структурной модели суперъячейки 2D-интерфейса Si/Ge/Si: структура состоит из 54 атомов, в которой 18 – это атомы германия и 36 – атомы кремния

Затем в системе Si/Ge/Si создавалась свободная валентная связь (дырка) и задавалась начальная намагниченность. Дырка создавалась путем удаления одного электрона из системы. Для наглядной демонстрации вклада созданной электронной вакансии в электростатический потенциал мы сопоставили графики зависимостей электростатического потенциала системы от концентрации дырок и заданного направления начальной намагниченности (рис. 3).

Видно, что при добавлении в систему дырки электростатический потенциал уменьшается. Графики практически идентичны как при заданном направлении намагниченности вверх (рис 3, *a*), так и вниз (рис 3, *b*). Разница состоит лишь в том, что в первом случае расстояние  $\Delta$  между первыми пиками составляет  $0,670 \text{ эВ}$  (рис. 3, *a*), а во втором –  $0,642 \text{ эВ}$  (рис. 3, *b*). Это указывает на тот факт, что знак намагниченности практически не вносит вклада в распределение электростатического потенциала в систему, при этом само значение потенциала больше приходится на атомы кремния.

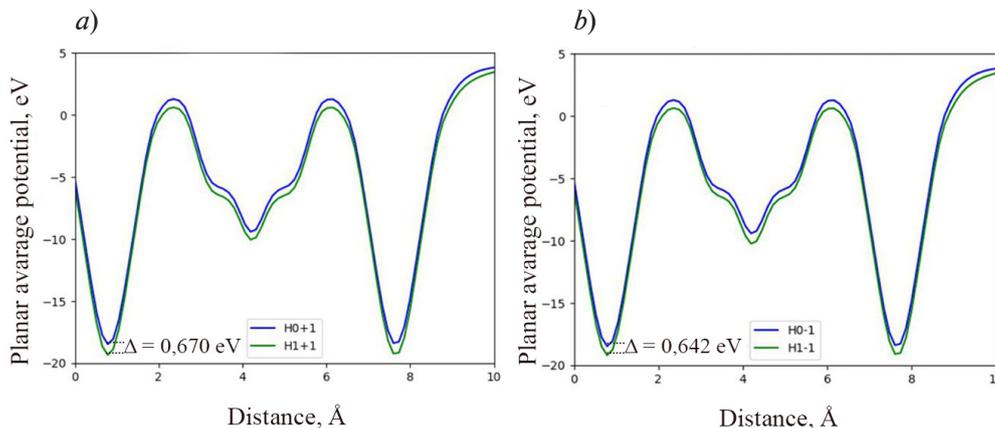


Рис. 3. Сравнение зависимостей электростатического потенциала системы Si/Ge/Si от концентрации дырок с заданными направлениями намагниченности системы +1 (вверх) и –1 (вниз) (*a* и *b* соответственно). Сопоставлены случаи системы без дырок (синие кривые) и с одной дыркой (зеленые кривые)

Расчет электростатического потенциала был выполнен для того, чтобы рассчитать работу выхода  $W$  для каждого случая. С этой целью применялась следующая формула:

$$W = -e\phi - E_f,$$

где  $e$  – заряд электрона,  $\phi$  – значение электростатического потенциала вблизи вакуума,

$E_F$  – уровень Ферми.

Полученные расчетные результаты представлены в таблице.

Таблица

**Зависимость работы выхода для интерфейса от направления намагниченности и наличия дырок**

Направление намагниченности	Работа выхода $W$ , эВ	
	Отсутствие дырки	Наличие дырок
вверх	4,946	6,460
вниз	4,970	6,456

Из данных рис. 3 и таблицы следует, что значение электростатического потенциала уменьшается при добавлении в систему дырки, а работа выхода растет. Кроме того, можно сделать вывод, что в системе с направлением намагниченности  $-1$  (вниз) работа выхода в отсутствие дырок больше, чем в системе с намагниченностью  $+1$  (вверх). В случае наличия дырок работа выхода становится примерно одинаковой для обоих случаев.

**Заключение**

В данной работе были рассчитаны зонная структура и плотность состояний для двухмерного слоя Si/Ge/Si. Эти расчеты показали, что основная часть электронных состояний локализована в интервале энергий от  $-2$  до  $-4$  эВ. Изменения же в зонной структуре Si/Ge/Si, по сравнению с индивидуальными зонными структурами германия и кремния, вызваны образованием интерфейсных состояний, что приводит к появлению в ней новых энергетических полос. При добавлении в систему дырки электростатический потенциал снижается за счет смещения уровня энергетического вакуума, при этом знак заданной начальной намагниченности вносит несущественный вклад в изменение электростатического потенциала в системе. Показано, что в системе с отрицательной начальной намагниченностью работа выхода больше, чем в системе с положительной, и что добавление дырки в системы с разной намагниченностью уравнивает значения работы выхода.

В заключение следует отметить, что полученные результаты могут быть использованы для проектирования квантовых вычислителей или квантовых сенсоров для нанoeлектроники следующего поколения.

Исследования выполнены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных» Вычислительного центра Дальневосточного отделения Российской академии наук», г. Хабаровск.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Chibisov A. N., Chibisova M. A. *Ab initio* calculation of the equilibrium quantum state for hole qubit and electrostatic characteristics of the B : Si system // Journal of Computational Electronics. 2021. Vol. 20. No. 5. Pp. 1959–1963.
2. Chibisov A. N., Aleshin M. S., Chibisova M. A., DFT analysis of hole qubits spin state in germanium thin layer // Nanomaterials. 2022. Vol. 12. No. 13. P. 2244.
3. Fang Y., Philippopoulos P., Culcer D., Coish W. A., Chesi S. Recent advances in hole-spin qubits // Materials for Quantum Technology. 2023. Vol. 3. No. 1. P. 012003.
4. Valentini M., Borovkov M., Prada E., Martí-Sánchez S., Botifoll M., Hofmann A. C., Arbiol J., Aguado R., San-Jose P., Katsaros G. Majorana-like Coulomb spectroscopy in the absence of zero-bias peaks // Nature. 2022. Vol. 612. No. 7940. Pp. 442–447.
5. Watzinger H., Kukučka J., Vukušić L., Gao F., Wang T., Schäffler F., Zhang J.-J., Katsaros G. A germanium hole spin qubit // Nature Communications. 2018. Vol. 9. 25 September. P. 3902.
6. Goncharov A. V., Chibisov A. N. Effect of external pressure and quantum state on the local magnetization of germanium layers: *Ab initio* calculation // Advanced Theory and Simulations. 2023. Vol. 6. No. 3. P. 2200816.

7. Chibisov A. N., Chibisova M. A., Prokhorenko A. V., Obrazcov K. V., Fedorov A. S., Yu Yang-Xin. Possibilities of controlling the quantum states of hole qubits in an ultrathin germanium layer using a magnetic substrate: Results from *ab initio* calculations // *Nanomaterials*. 2023. Vol. 13. No. 23. P. 3070.
8. Watzinger H., Kloeffel C., Vukušić L., et al. Heavy-hole states in germanium hut wires // *Nano Letters*. 2016. Vol. 16. No. 11. Pp. 6879–6885.
9. Ueno N., Sacuraba M., Osakabe Y., Akima H., Sato S. Electronic properties of Si/Si-Ge Alloy/Si(100) heterostructures formed by ECR Ar plasma CVD without substrate heating // *Materials Science Semiconductor Processing*. 2017. Vol. 70. 1 November. P. 55–62.
10. Antonova I. V., Kagan M. S., Polyakov V. I., Golik L. L., Kolodzey J. Effect of interface states on population of quantum wells in SiGe/Si structures // *Physica Status Solidi C*. 2005. Vol. 2. No. 6. Pp. 1924–1928.
11. Žutić I., Fabian J., Erwin S. C. Spin injection and detection in silicon // *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 97. No. 2. P. 026602.
12. Gao F., Zhang J. Y., Wang J. H., et al. Ge/Si quantum wires for quantum computing // *Proceedings of the 5th IEEE Electron Devices Technology and Manufacturing Conference (EDTM-2021)*. April 8–11, 2021. Chengdu, China, IEEE Inc. P. 9420817.
13. Ercan H. E., Friesen M., Coppersmith S. N. Charge-noise resilience of two-electron quantum dots in Si/SiGe heterostructures // *Physical Review Letters*. 2022. Vol. 128. No. 24. P. 247701.
14. Paquelet Wuetz B., Loset M. P., Koelling S., et al. Atomic fluctuations lifting the energy degeneracy in Si/SiGe quantum dots // *Nature Communications*. 2022. Vol. 13. 13 December. P. 7730.
15. Kresse G., Hafner J. *Ab initio* molecular dynamics for liquid metals // *Physical Review B*. 1993. Vol. 47. No. 1. P. 558.
16. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // *Computational Materials Science*. 1996. Vol. 6. No. 1. Pp. 15–50.
17. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Physical Review Letters*. 1996. Vol. 77. No. 18. P. 3865.
18. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special points for Brillouin-zone integrations // *Physical Review B*. 1976. Vol. 13. No. 12. P. 5188.

## REFERENCES

1. Chibisov A. N., Chibisova M. A., *Ab initio* calculation of the equilibrium quantum state for hole qubit and electrostatic characteristics of the B:Si system, *J. Comput. Electron.* 20 (5) (2021) 1959–1963.
2. Chibisov A. N., Aleshin M. S., Chibisova M. A., DFT analysis of hole qubits spin state in germanium thin layer, *Nanomaterials*. 12 (13) (2022) 2244.
3. Fang Y., Philippopoulos P., Culcer D., et al., Recent advances in hole-spin qubits, *Mater. Quantum Technol.* 3 (1) (2023) 012003.
4. Valentini M., Borovkov M., Prada E., et al., Majorana-like Coulomb spectroscopy in the absence of zero-bias peaks, *Nature*. 612 (7940) (2022) 442–447.
5. Watzinger H., Kukučka J., Vukušić L., et al., A germanium hole spin qubit, *Nat. Commun.* 9 (25 Sept) (2018) 3902.
6. Goncharov A. V., Chibisov A. N., Effect of external pressure and quantum state on the local magnetization of germanium layers: *Ab initio* calculation, *Adv. Theory Simul.* 6 (3) (2023) 2200816.
7. Chibisov A. N., Chibisova M. A., Prokhorenko A. V., et al., Possibilities of controlling the quantum states of hole qubits in an ultrathin germanium layer using a magnetic substrate: Results from *ab initio* calculations, *Nanomaterials*. 13 (23) (2023) 3070.
8. Watzinger H., Kloeffel C., Vukušić L., et al. Heavy-hole states in germanium hut wires, *Nano Lett.* 16 (11) (2016) 6879–6885.
9. Ueno N., Sacuraba M., Osakabe Y., et al., Electronic properties of Si/Si-Ge Alloy/Si(100) heterostructures formed by ECR Ar plasma CVD without substrate heating, *Mater. Sci. Semicond.* 70 (1 Nov) (2017) 55–62.

10. Antonova I. V., Kagan M. S., Polyakov V. I., et al., Effect of interface states on population of quantum wells in SiGe/Si structures, Phys. Status Solidi C. 2 (6) (2005) 1924–1928.
11. Žutić I., Fabian J., Erwin S. C., Spin injection and detection in silicon, Phys. Rev. Lett. 97 (2) (2006) 026602.
12. Gao F., Zhang J. Y., Wang J. H., et al., Ge/Si quantum wires for quantum computing, Proc. 5th IEEE Electron Devices Technology and Manufacturing Conf. (EDTM-2021). April 8–11, 2021. Chengdu, China, IEEE Inc. (2021) 9420817.
13. Ercan H. E., Friesen M., Coppersmith S. N., Charge-noise resilience of two-electron quantum dots in Si/SiGe heterostructures, Phys. Rev. Lett. 128 (24) (2022) 247701.
14. Paquelet Wuetz B., Loset M. P., Koelling S., et al., Atomic fluctuations lifting the energy degeneracy in Si/SiGe quantum dots, Nat. Commun. 13 (13 Dec) (2022) 7730.
15. Kresse G., Hafner J., *Ab initio* molecular dynamics for liquid metals, Phys. Rev. B. 47 (1) (1993) 558.
16. Kresse G., Furthmüller J., Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, Comput. Mater. Sci. 6 (1) (1996) 15–50.
17. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M., Generalized gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett. 77 (18) (1996) 3865.
18. Monkhorst H. J., Pack J. D., Special points for Brillouin-zone integrations, Phys. Rev. B. 13 (12) (1976) 5188.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ОБРАЗЦОВ Кирилл Владимирович** – лаборант кафедры физики Тихоокеанского государственного университета, младший научный сотрудник Вычислительного центра Дальневосточного отделения РАН, г. Хабаровск, Россия. 680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул., 136.

680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул., 136.

2018102293@pnu.edu.ru

ORCID: 0009-0001-6034-7757

**ЧИБИСОВ Андрей Николаевич** – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Вычислительного центра Дальневосточного отделения Российской академии наук, г. Хабаровск, Россия.

680000, Россия, г. Хабаровск, ул. Ким Ю Чена, 65

andreichibisov@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-5410-8661

**МАМОНОВА Марина Владимировна** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Омского государственного университета имени Ф. М. Достоевского, г. Омск, Россия.

644077, г. Омск, проспект Мира, д. 55-А

mamonovamv@omsu.ru

ORCID: 0000-0001-7466-086X

#### THE AUTHORS

**OBRAZCOV Kirill V.**

*Computing Center of the Far Eastern Branch of the RAS.*

*Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia*

*Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia*

2018102293@pnu.edu.ru

ORCID: 0009-0001-6034-7757

**CHIBISOV Andery N.**

*Computing Center of the Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences*

*65 Kim Yu Chen St., Khabarovsk, 680000, Russia*

andreichibisov@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-5410-8661

**MAMONOVA Marina V.**

*Omsk State University Named after Dostoevsky*

55-A Mir Ave., Omsk, 644077, Russia

mamonovamv@omsu.ru

ORCID: 0000-0001-7466-086X

*Статья поступила в редакцию 09.12.2024. Одобрена после рецензирования 16.01.2025.  
Принята 16.01.2025.*

*Received 09.12.2024. Approved after reviewing 16.01.2025. Accepted 16.01.2025.*