

02;06

Двухкубитовая ячейка для квантового компьютера на основе боронитридных нанотрубок

© М.Б. Белоненко,¹ Н.Г. Лебедев²

¹ Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,
400074 Волгоград, Россия
e-mail: mbelonenko@yandex.ru

² Волгоградский государственный университет,
400062 Волгоград, Россия
e-mail: nikolay.lebedev@volsu.ru

(Поступило в Редакцию 31 октября 2007 г. В окончательной редакции 4 апреля 2008 г.)

Исследовано электронное строение боронитридной нанотрубки (8,0), интеркалированной атомами щелочных и ионами щелочно-земельных металлов. Расчеты показали, что спиновая плотность локализована на отдельных атомах или ионах. Кроме того, энергетически более выгодным оказывается антиферромагнитное состояние линейной цепочки атомов и ионов. Обменное взаимодействие между спинами является относительно малой величиной. Предлагается использовать подобные системы в качестве двухкубитовой ячейки для квантового компьютера.

PACS: 61.46.Fg, 73.22-f, 85.70.Li, 85.75.Ff

Введение

Интерес к квантовым компьютерам, позволяющим за счет квантового параллелизма значительно ускорить вычисления, заметно возрос после основополагающих работ [1–3], в которых описаны эффективные квантовые алгоритмы. Среди различных физических реализаций квантового компьютера интересной является модель последнего на основе квантового кристалла, представляющего собой одномерную цепочку ионов (например, Be^+ , Mg^+ , Ca^+), удерживаемых вдоль оси запирающим потенциалом, а в поперечных оси направления комбинациями постоянных и переменных электрических полей, аналогичных используемым в ловушках Паули [4]. В настоящее время известны экспериментально полученные квантовые кристаллы из 11 ионов. В то же время хорошо известно, что для построения квантового компьютера необходимо производить операцию NOT над одним кубитом (квантовый бит), и операцию CONTROLLED NOT над двумя кубитами, или, другими словами, должно существовать взаимодействие между физическими системами, реализующими кубиты. В обсуждаемой выше модели эту роль играет косвенное взаимодействие ионов через низшую колебательную моду квантового кристалла [5].

Основные трудности возникают на пути экспериментальной реализации полномасштабного (т.е. содержащего порядка 1000 кубитов) компьютера. На наш взгляд, к ним относятся высокие требования к точности задания постоянных и переменных полей в ловушках типа ловушек Паули; поперечная неустойчивость одномерного квантового кристалла (т.е. склонность кристалла к образованию конфигураций типа „зигзаг“); требование глубокого лазерного охлаждения ионов для обеспечения взаимодействия через низшую колебательную моду. В то

же время возможность индивидуального обращения к отдельному кубиту, способность легко обеспечить инициализацию квантового компьютера составляют несомненное достоинство данной модели [6].

В связи с вышеизложенным и произошла стимуляция настоящей работы, направленной на разрешение упомянутых трудностей.

Постановка задачи

Вышеописанная проблема стабилизации одномерных цепочек ионов может быть решена, на наш взгляд, если заключить данную цепочку в изолирующую оболочку (потенциальную ловушку). В качестве протяженных (квазиодномерных) изолирующих оболочек могут выступить интенсивно исследуемые в последнее время нанотубулярные структуры [7]. Предполагается, что заключенные в трубки ионные цепочки будут стабилизированы благодаря межатомному потенциалу стенок цилиндрической оболочки.

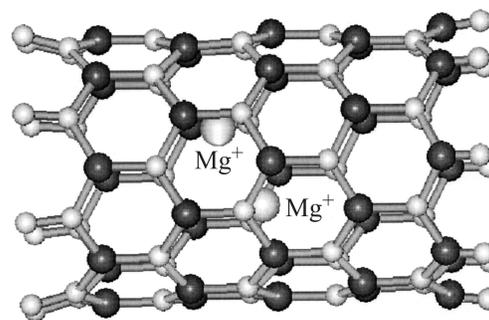
Нанотрубки (НТ) представляют собой цилиндрические структуры до нескольких микронов длиной и несколько нанометров диаметром. Геометрическую структуру НТ общепринято характеризовать двумя параметрами (m, n) , где n и m — индексы хиральности трубки. Представителями таких нанотрубок, в частности, являются НТ на основе углерода и нитрида бора, свойства которых относительно хорошо исследованы теоретически и экспериментально [7]. Углеродные и боронитридные НТ представляют собой гексагональную решетку атомов углерода или бора и азота соответственно, свернутую в цилиндр. Структурным элементом данной НТ являются шестичленные атомные циклы (гексагоны).

В настоящее время хорошо известна способность НТ, в частности, углеродных, втягивать в себя атомы различных элементов (капиллярные эффекты) [7]. В связи с этим рассмотрим модификацию квантового кристалла, состоящую в том, что ионы (например, Be^+ , Mg^+ и др.) или атомы (например, Li , Na и др.) помещаются внутрь углеродной или боронитридной нанотрубки посредством капиллярного эффекта или приложением электрического поля вдоль оси нанотрубки. Запирающий потенциал для ионов может создаваться как приложением внешних электрических полей, так и путем закрывания концов самой нанотрубки соответствующими крышками или различными функциональными концевыми группами. В этом случае уже не требуются постоянные и переменные поля для удержания ионов в направлении, перпендикулярном оси НТ, а неустойчивость квантового кристалла в указанном направлении стабилизируется стенками нанотрубки. Также сохраняются уже упомянутые достоинства квантовых кристаллов (легкость инициализации и обращения к отдельному кубиту). Отметим, что все операции с отдельными кубитами проводятся, как и в случае квантового кристалла, с помощью внешних постоянных и переменных полей [6].

Для того чтобы выяснить возможность проведения двухкубитовых операций (в частности, без использования косвенного свидетельства взаимодействия через колебательную моду), проведены нижеследующие квантово-химические расчеты [8]. Фактически целью данной работы является теоретическое исследование электронно-энергетического строения углеродных и боронитридных НТ, заполненных одномерными цепочками атомов щелочных и ионов щелочно-земельных металлов. Квантово-химические расчеты проводились с помощью квантово-химического программного пакета MNDO92, являющегося модификацией программы MNDO85 [9]. Все энергетические характеристики нанотубулярных структур посчитаны с точностью 10^{-4} eV.

Модель кубитовой ячейки

Для моделирования геометрической структуры НТ на основе углерода и нитрида бора использована модель молекулярного кластера [10]. Заключается она в следующем. Выбираем фрагмент НТ, состоящий из нескольких элементарных слоев, т.е. по несколько элементарных ячеек вдоль оси трубки. В данном случае в качестве модели квантового кристалла использовался фрагмент (8,0) НТ с 4 элементарными слоями. Разорванные граничные связи на концах НТ замыкались атомами водорода, чтобы уменьшить влияние границы кластера на электронно-энергетический спектр НТ. Внутри выбранного фрагмента помещались 2 атома щелочных или 2 иона щелочно-земельных металлов соответственно, а именно пары атомов Li , Na и K и ионов Be^+ , Mg^+ . Полученная структура изображена на рисунке на



Молекулярный кластер боронитридной нанотрубки (8,0), интеркалированной парой ионов Mg^+ . Светлые шарики — атомы азота, темные — атомы бора, малыми светлыми шариками изображены атомы водорода, ионы магния показаны внутри трубки большими шарами.

примере боронитридной НТ (8,0), интеркалированной двумя ионами Mg^+ .

Квантово-химические расчеты геометрических и электронно-энергетических характеристик выбранного кластера проводились в рамках полуэмпирического метода MNDO [10,11], хорошо зарекомендовавшего себя в изучении больших молекулярных систем. В этом методе волновая функция системы выбирается в виде слейтеровского определителя, построенного из одночастичных молекулярных орбиталей, которые, в свою очередь, представляются линейной комбинацией канонических (s -, p -типа) атомных орбиталей [10]. Матрица коэффициентов разложения (собственных векторов) \mathbf{C} определяет волновую функцию системы в матричном представлении. Для нахождения собственных векторов и собственных значений $\{\epsilon\}$ гамильтониана решается матричное (секулярное или вековое) уравнение итерационным методом. Матрица электронной плотности, или матрица порядков связей \mathbf{P} , в базисе атомных орбиталей строится из коэффициентов разложения [10]:

$$P_{\mu\nu} = \sum_i n_i C_{\mu i}^* C_{\nu i}, \quad (1)$$

где n_i — заселенность i -й молекулярной орбитали, индексы μ и ν нумеруют атомные волновые функции. Матрица порядков связей характеризует электронную плотность, локализованную на соответствующих атомных орбиталях.

В квантово-химических расчетах электронного строения изучаемых систем геометрические параметры НТ не менялись, т.е. использовалось приближение жесткой решетки, а параметры атомов и ионов металлов, встроенных в НТ, оптимизировались путем минимизации функционала полной энергии системы методом сопряженных градиентов. Длина межатомных связей в трубках полагалась равной 1.44 и 1.46 Å для углеродных и боронитридных НТ соответственно. Данные значения длины межатомных связей в нанотрубках получены

в процессе предварительной оптимизации геометрии фрагментов НТ.

Поскольку нанотрубки заполнялись парой атомов или ионов, имеющих по одному электрону на валентной s -оболочке, были рассмотрены различные спиновые состояния системы, а именно *синглетное*, когда спины s -электронов атомов или ионов, интеркалированных внутрь НТ, противоположно направлены, и полный спин кластера $S = 0$, и *триплетное*, когда спины электронов параллельны, и полный спин $S = 1$.

Обсуждение результатов

Квантово-химические расчеты электронного и геометрического строения кластеров углеродных НТ, заполненных парами металлических частиц, привели к отрицательному результату в свете решаемой задачи. Анализ собственных векторов \mathbf{C} , из которых строится матрица электронной плотности \mathbf{P} , показал, что s -электроны металлических частиц оказываются делокализованными, т.е. молекулярные орбитали, на которых находятся данные электроны, имеют большой вклад, помимо атомных s -орбиталей металлических атомов, также p -орбиталей углеродных атомов НТ. Фактически это означает перенос электронной плотности с металлических атомов или ионов на углеродную НТ, что можно объяснить особенностями электронного строения самой трубки, а именно наличием у нее π -электронной системы, которая сама является делокализованной. В такой ситуации, на наш взгляд, нельзя создать кубитовую ячейку, работающую на электронной подсистеме, на основе углеродной нанотрубки, заполненной металлическими частицами.

Совсем другой результат получается в расчетах кластеров на основе борнитридных (BN) нанотрубок. Анализ собственных векторов показал, что p -электроны металлических частиц, помещенных внутрь BN-НТ, оказываются локализованными на металлических атомах или ионах. Другими словами, основной вклад в молекулярные орбитали, на которых находятся данные электроны, вносят p -атомные орбитали соответствующих атомов или ионов. Перенос электронной плотности на саму борнитридную НТ оказывается незначительным. Поэтому результаты именно этих расчетов в данной статье описываются более подробно и обсуждаются ниже.

Основные результаты квантово-химических расчетов геометрических и энергетических характеристик борнитридных нанотрубок, заполненных парами атомов щелочных и ионов щелочноземельных металлов, представлены в таблице, в которой приведены межатомные расстояния металлической подрешетки R_{AB} в синглетном ($S = 0$) и в триплетном ($S = 1$) состояниях, энергии интеркалирования систем в триплетном (ΔE_T) и в синглетном (ΔE_S) состояниях, энергия синглет-триплетного переворота ΔE_{TS} . Энергия интеркалирования НТ вычислялась как разность между энергией заполненной трубки

и суммарной энергией „чистой“ трубки и отдельной металлической частицы.

Кластер	ΔE_T , eV	ΔE_S , eV	R_{AB} , Å ($S = 1$)	R_{AB} , Å ($S = 0$)	ΔE_{TS} , eV
(8,0)@2Li	4.41	-0.91	2.68	2.1	0.89
(8,0)@2Na	-4.79	-21.07	2.40	2.4	0.24
(8,0)@2K	0.12	0.57	3.88	3.7	0.18
(8,0)@2Be ⁺	18.03	-	1.98	-	0.01
(8,0)@2Mg ⁺	3.30	-	3.07	-	0.11

и суммарной энергией „чистой“ трубки и отдельной металлической частицы.

Энергия синглет-триплетного переворота вычислялась с помощью одноэлектронных энергетических спектров изучаемых систем как разность энергий перехода электрона в первое возбужденное состояние без изменения (синглет-синглетный переход) и с изменением (синглет-триплетный переход) мультиплетности системы по следующим формулам [12]:

$$E_S = \varepsilon_j - \varepsilon_i - J_{ij} + 2K_{ij}, \quad (2)$$

$$E_T = \varepsilon_j - \varepsilon_i - J_{ij}, \quad (3)$$

$$\Delta E_{TS} = 2K_{ij}, \quad (4)$$

где ε_j — энергия нижнего вакантного одноэлектронного молекулярного уровня (НВМО), ε_i — энергия верхнего заполненного одноэлектронного молекулярного уровня (ВЗМО), J_{ij} и K_{ij} — кулоновский и обменный интегралы в базисе молекулярных орбиталей [10]:

$$J_{ij} = \sum_{\mu,\nu} \sum_{\lambda,\sigma} C_{\mu i} C_{\nu i} C_{\lambda j} C_{\sigma j} \langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle, \quad (5)$$

$$K_{ij} = \sum_{\mu,\nu} \sum_{\lambda,\sigma} C_{\mu i} C_{\lambda i} C_{\nu j} C_{\sigma j} \langle \mu\lambda | \nu\sigma \rangle, \quad (6)$$

где $\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle$ — интеграл кулоновского отталкивания электронов в базисе канонических атомных орбиталей μ , ν , λ и σ , который вычисляется в рамках метода MNDO [10,11].

Анализ результатов квантово-химических расчетов (см. таблицу) показал, что энергетически более выгодными являются синглетные состояния пар атомов и ионов. Положительное значение энергий интеркалирования атомов и ионов в триплетном состоянии свидетельствует об их метастабильном состоянии в борнитридной нанотрубке. Тем не менее электроны оказываются по-прежнему локализованными на металлических частицах. Только диэлектрические трубки удерживают линейную цепочку металлических атомов и ионов в квазиустойчивом состоянии.

В ряду щелочных металлов энергетическая выгода адсорбции атомов внутрь нанотрубки изменяется монотонно с ростом порядкового номера атома. Наиболее

выгодным оказывается интеркалирование атома натрия как в синглетном, так и триплетном спиновом состояниях. Это связано с тем, что атомный радиус Na (1.92 \AA) оказывается оптимальным для (8,0) НТ ($d = 6.4 \text{ \AA}$), чтобы образовать устойчивую структуру. Атомы лития и калия имеют меньший (1.57 \AA) и больший (2.31 \AA) атомные радиусы соответственно, что приводит к энергетически менее выгодной геометрической системе. Атом лития благодаря малому радиусу оказывается более подвижным в трубке. Тем не менее атом Li в синглетном состоянии образует устойчивую структуру с данной нанотрубкой. Атом калия образует достаточно напряженную структуру, стремясь деформировать поверхность нанотрубки так, чтобы она соответствовала его большому радиусу. Скорее всего, эти атомы будут устойчивыми в нанотрубках соответственно меньшего и большего диаметров, т.е. (6,0) или (7,0) НТ для атома Li и (9,0) или (10,0) НТ для атома K. Другими словами, подобные квантово-химические расчеты позволили предсказать оптимальный диаметр нанотрубок, который требуется для эффективного интеркалирования соответствующего элемента.

Что касается ионов щелочно-земельных металлов, то здесь ситуация аналогична. Ион магния, имеющий больший ионный радиус (0.71 \AA), чем у бериллия (0.30 \AA), также оказывается в более выгодном энергетическом положении. В таблице представлены результаты квантово-химического расчета только для триплетного состояния ионов. Расчеты синглетных состояний оказались неустойчивыми для заданной общей точности, итерационный процесс решения секулярного уравнения оказался расходящимся. Расчеты с более низкой точностью не проводились, чтобы сохранить общую картину исследования. Поэтому в таблице в соответствующих местах стоят пропуски.

Как видно из таблицы, энергия синглет-триплетного переворота ΔE_{TS} в ряду атомов щелочных металлов убывает с ростом порядкового номера элемента. Величина данной энергии определяет значение интеграла обменного взаимодействия между электронными спинами: он равен половине энергии синглет-триплетного переворота. Поскольку энергетически более выгодным является заполнение трубки атомами Na, то следует акцентировать внимание именно на этом элементе. Обменное взаимодействие между электронами, локализованными на атомах щелочных металлов, в этом случае равно примерно 0.1 eV .

Что касается ионов щелочно-земельных металлов, то величина ΔE_{TS} возрастает с ростом порядкового номера элемента. Однако в работе рассмотрено очень небольшое число щелочно-земельных элементов, поэтому говорить об общей тенденции преждевременно. Для ионов Mg^+ эта энергия составляет 0.11 eV , что является, на наш взгляд, относительно малой величиной и может свидетельствовать о возможности практического использования данной системы в роли квантового бита. Здесь также следует отметить, что ион бериллия,

интеркалированный в трубке, создает энергетически невыгодную структуру, его малое обменное взаимодействие (0.005 eV) не принимается во внимание.

Относительно малая энергия ΔE_{TS} позволяет создать достаточно простой механизм управления спинами электрона (механизм синглет-триплетного переключения кубита) с помощью внешнего электромагнитного поля, например, лазерного импульса.

Геометрические характеристики полученных систем также заслуживают внимания. Из рисунка хорошо видно, что образовавшиеся металлические провода внутри трубки имеют зигзагообразную структуру. Кроме того, расстояние между атомами металлов практически не зависит от мультиплетности системы (см. таблицу), что свидетельствует в пользу применения этих систем в качестве квантового кристалла. Только для атома Li наблюдается сильное изменение длины связи, что также связано с невыгодной структурой.

Заключение

Таким образом, расчеты ионного строения борнитридных нанотрубок, интеркалированных атомами щелочных или ионами щелочно-земельных металлов, показали, что в данной модели возникает обменное взаимодействие между спинами атомов и ионов гейзенберговского типа с характерной энергией от 0.89 eV (для атомов Li) до 0.1 eV (для ионов Mg^+). Основным состоянием спинов, локализованных на отдельных металлических частицах, является синглетное (т.е. преобладает антиферромагнитный тип упорядочения). Данное обстоятельство позволяет сделать вывод, что двухкубитовое взаимодействие можно осуществить напрямую, без использования колебательных мод (и следовательно, исключая процессы декогерентизации, связанные с излучением движущихся зарядов в колебательной моде). Методы выполнения операции CONTROLLED NOT в двухкубитовой системе, связанной гейзенберговским взаимодействием, хорошо известны, и для данного диапазона не представляют трудностей. Кроме того, отметим, что наличие антиферромагнитного типа упорядочения позволяет кодировать состояния кубита при помощи не одного, а нескольких ионов [13], что повышает защищенность от ошибок.

Вместе с тем необходимо отметить, что в предлагаемом подходе возникает ряд трудностей, требующих дополнительного изучения. Так, возможен дополнительный механизм декогерентизации, обусловленный косвенным взаимодействием спинов атомов или ионов через электронную (как в углеродных НТ [14]) и фоновую подсистемы BN-нанотрубки. Если колебания собственно нанотрубки можно демпфировать посредством, например, использования пучка нанотрубок, то подавление косвенного взаимодействия через электроны проводимости требует дополнительного изучения и является предметом отдельного исследования. Таким образом,

предложенная модель квантового кристалла на основе боронитридных нанотрубок позволяет сохранить все достоинства схем с использованием ловушек типа Паули и избавиться от ряда присущих им недостатков.

В заключение необходимо отметить, что многослойные и однослойные боронитридные нанотрубки на данный момент являются синтезированными и изучаются экспериментально [15–17]. Кроме того, в настоящее время бурно развиваются теоретические и экспериментальные исследования углеродных и боронитридных „стручков“ (reapods), которые представляют собой нанотрубки с помещенными внутрь цепочками фуллеренов, а те в свою очередь могут быть с внедренными в них атомами металлов [18–22]. Такие системы могут применяться для создания кубитов, поскольку атомы внутри фуллеренов оказываются изолированными. Модель подобного кубита на данный момент разработана для ядерной спиновой подсистемы, и ее контроль осуществляется с помощью эффекта ЯМР [23].

Следует отметить: тенденция развития современных технологий такова, что в скором времени будет возможно создание сверхузких электромагнитных пучков, воздействующих на объекты нанометрового масштаба. Это позволит направлению изменять свойства таких объектов, в частности, ориентацию одиночных электронных и ядерных спинов. В настоящее время уже разработаны рентгеновские волноводы, позволяющие фокусировать электромагнитное излучение в пучки диаметром 100 nm [24,25]. Кроме того, углеродные НТ сейчас используются для разработки рентгеновских излучателей [26] и структурных элементов рентгеновских излучателей, позволяющих получать рекордно малые диаметры фокусировки [27].

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 07-03-96604).

Список литературы

- [1] *Shor P.* // SIAM J. Comp. 1997. Vol. 26. P. 1484–1509.
- [2] *Grover L.K.* // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 79. P. 325–328.
- [3] *Deutsch D.* // Proc. Roy. Soc. Lond. 1985. Vol. A400. P. 97–117.
- [4] *Paul W.* // Red. Mod. Phys. 1990. Vol. 62. P. 531.
- [5] *Hughes R.J., James D.F.V., Gomes J.J., Holzscheiter M., Kwiat P.G., Lomoreaux S.K., Peterson C.G., Sandberg V.D., Schauer M.M., Simmons C.M., Thorburn C.E., Tura D., Wang P.Z., White F.G.* // Fortschr. Phys. 1998. Vol. 46. № 4–5. P. 329–361.
- [6] *Валиев К.А., Кокин А.А.* Квантовые компьютеры: надежность и реальность. Ижевск: РХД, 2001. 352 с.
- [7] *Харрис П.* Углеродные нанотрубки и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.
- [8] *Belonenko M.B., Lebedev N.G., Zaporotzkova I.V.* // 6th Biennial Int. Workshop „Fullerenes and Atomic clusters“. Abstracts of invited lectures & contributed papers. St. Petersburg, 2003. P. 91.
- [9] *Близнюк А.А., Войтюк А.А.* // Журн. структ. химии. 1986. Т. 27. № 4. С. 190–191.
- [10] *Степанов Н.Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.
- [11] *Dewar M.J.S., Thiel W.* // J. Amer. Chem. Soc. 1977. Vol. 99. P. 4899–4906.
- [12] *Эварестов Р.А.* Квантово-химические методы в теории твердого тела. Л.: Изд-во ЛГУ, 1982. 280 с.
- [13] *Stean A.M.* // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 77. P. 793–797.
- [14] *Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Майгуров А.А.* // Укр. физ. журн. 2000. Т. 45. № 10. С. 1229–1232.
- [15] *Chopra N.G., Luyken R.S., Cherrey K., Crespi V.N., Cohen M.L., Louie S.G., Zettl A.* // Science. 1995. Vol. 269. P. 966.
- [16] *Loiseau A., Willame F., Demoncey N., Hug G., Prasad H.* // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 4737.
- [17] *Bengu E., Marks L.D.* // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. P. 2385.
- [18] *Smith B.W., Monthieux M., Luzzi D.E.* // Nature. 1998. Vol. 396. P. 323.
- [19] *Suenaga K., Okazaki T., Wang C.-R., Bandow S., Shinohara H., Iijima S.* // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. N 5. P. 055 506.
- [20] *Okada S., Saito S., Oshiyama A.* // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. P. 3835–3838.
- [21] *Okada S., Oshiyama A., Saito S.* // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. P. 7634–7638.
- [22] *Okada S., Saito S., Oshiyama A.* // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 64. P. 201 303(R).
- [23] *Price M.D., Havel T.F., Cory D.G.* // New J. Phys. 2000. Vol. 2. P. 10.1.
- [24] *Egorov V.K., Egorov E.V.* // Advances in X-ray analysis. 2003. Vol. 46. P. 307–313.
- [25] *Egorov V.K., Egorov E.V.* // Proc. of MRS. 2002. Vol. 716. P. 189–195.
- [26] *Окотруб А.В., Дабагов С.Б., Кудашов А.Г., Гусельников А.В., Кинлох И., Виндл А.Х., Чувилин А.Л., Булушева Л.Г.* // Письма в ЖЭТФ. 2005. Т. 81. Вып. 1. С. 37–42.
- [27] *Heo S.H., Ihsan A., Cho S.O.* // Appl. Phys. Lett. 2007. Vol. 90. P. 183 109.