

Nieustany postęp w mikroelektronice doprowadził w ostatnich latach do powstania układów elektronicznych o wielkiej skali integracji. Współczesne tranzystory osiągnęły wymiary rzędu 14 nanometrów. Prowadzone obecnie prace badawcze mają na celu przesunięcie granicy miniaturyzacji jeszcze dalej, przy czym granica 5 nanometrów ma zostać osiągnięta w przeciągu najbliższych pięciu lat. Rozmiary te odpowiadają mniej niż 20 monowarstwom atomów krzemu. Taka skala miniaturyzacji sprawia, że charakterystyka pracy tranzystorów jest w dużym stopniu kontrolowana przez obecność pojedynczych atomów domieszek, takich jak na przykład fosfor. Kontrola procesu pozycjonowania domieszek oraz zrozumienie ich wpływu na właściwości elektronowe oraz transportowe nanostruktur krzemowych może otworzyć drzwi dla przyszłych zastosowań takich jak tranzystory na pojedynczych atomach. Obok znaczenia przemysłowego układy oparte na precyzyjnym przestrzennym rozmieszczeniu pojedynczych domieszek są idealnymi kandydatami do zastosowania w spintronice czy informatyce kwantowej. W rzeczywistości krzem wydaje się optymalną matrycą dla tego rodzaju zadań. Krzem może być izotopowo wzbogacony izotopem  $^{28}\text{Si}$  o zerowym spinie jądrowym, przy znacznej koncentracji izotopu  $^{29}\text{Si}$  o niezerowym spinie. Izotopowo czysty materiał matrycy  $^{28}\text{Si}$  tworzy zatem 'półprzewodnik próżni', w której domieszki w krzemie mogą mieć niezwykle długie czasy koherencji oraz relaksacji spinowej, parametry mające fundamentalne znaczenie dla zastosowania w informatyce kwantowej. Te i podobne rezultaty czynią spiny domieszek w krzemie jednymi z najbardziej wolnych od dekoherencji układów, pokonując nawet układy atomowe w próżni.

Perspektywa połączenia kontroli kwantowych właściwości materii takich jak spin z niezwykle zaawansowanymi dojrzałymi technologiami produkcji urządzeń półprzewodnikowych pobudziła w ostatnich dziesięciu latach niezwykle intensywne prace badawcze. Badania te prowadzone są m.in. w kierunku wykorzystania sterowanych elektrycznie (za pomocą potencjałów bramki) domieszek jako pojedynczych qubitów oraz zbiorów qubitów o kontrolowanym elektrycznie oddziaływaniu między sobą. Kontrolowane tworzenie i manipulacja pojedynczymi domieszkami oraz wynikające z tego przyszłe zastosowania doprowadziły w rzeczy samej do powstania nowej gałęzi nauki: solotroniki (ang. solitary dopant optoelectronics). Z punktu widzenia opisu teoretycznego nanostruktury z pojedynczymi atomami domieszki wymagają zasadniczo odmiennego podejścia niż na przykład kryształy obrotowe. W szczególności dotyczy to domieszek wbudowanych w złożone otoczenie jakim są studnie, czy kropki kwantowe lub gdy przyłożone są zewnętrzne pola. W projekcie planujemy sformułować teorię, stworzyć narzędzia obliczeniowe oraz wykonać wieloskalowe obliczenia właściwości widmowych nanostruktur półprzewodnikowych domieszkowanych pojedynczymi atomami fosforu. Pojedynczy atom domieszki w otoczeniu milionów atomów krzemu stanowi w skomplikowany układ, w którym każdy z miliona atomów musi być indywidualnie uwzględniony w modelowaniu. Dlatego nasze podejście będzie wykorzystywało metodę ciasnego wiązania, która w naturalny sposób uwzględni efekty ograniczenia przestrzennego, efekty odkształceń, obecność zewnętrznych pól, czy te degenerację dolin w krzemie. Metoda ta pozwala również uwzględnić atomistyczne efekty, takie jak niejednorodność składu chemicznego, czy obecność atomowej szerokości fluktuacji grubości na złączach materiałów. Dzięki równoległemu, nasze obliczenia przeprowadzimy na klastrach komputerowych. Umożliwi to modelowanie nierozwiązalnych obecnie problemów obliczeniowych, w których funkcja falowa domieszki zdelokalizowana jest w nanostrukturze zawierającej ponad dziesięć milionów atomów. Zbadamy rolę materiału otaczającego domieszkę, wpływ niejednorodności stałej dielektrycznej, a także wpływ zewnętrznych pól na energię oraz inne właściwości widmowe domieszek w matrycy krzemowej. Zbadamy także transport nośników ładunku poprzez nanostruktury oparte na pojedynczych domieszkach. W projekcie wykonamy obliczenia dla wielu nanostruktur różniących się zarówno liczbą, jak i rozmieszczeniem atomów domieszki. Dzięki ściślejszej współpracy z Narodowym Instytutem Standardów i Technologii (NIST, USA) uzyskamy bezcenne możliwości do wiarygodnej weryfikacji rezultatów obliczeń.

Rezultaty uzyskane w projekcie będą miały istotne znaczenie dla badaczy projektujących przyszłe tranzystory krzemowe o atomowej skali miniaturyzacji, dla rozwoju urządzeń optoelektronicznych opartych o pojedyncze atomy oraz zastosowania nanostruktur krzemowych w dziedzinie informatyki kwantowej. Nasze badania pomogą w zrozumieniu wpływu elektrod na właściwości widmowe domieszek oraz pomogą w poznaniu mechanizmów sprzężenia pomiędzy donorami. Wyniki projektu, w tym zrozumienie mechanizmów kontroli funkcji falowej pojedynczego donora, mogą również pomóc w implementacji kwantowo-mechanicznych funkcjonalności na współczesnych krzemowych tranzystorach CMOS. Wyniki te dadzą niezbędną podstawę teoretyczną konieczną w efektywnej implementacji qubitów w technologii krzemowej. Oprócz możliwości przyszłych zastosowań w przemysle mikroelektronicznym lub informatyce kwantowej, prowadzone badania powinny mieć zasadnicze znaczenie dla zrozumienia właściwości widmowych przestrzennie ograniczonych układów wielu cząstek.