

# Управление электронными состояниями мелкого донора при помощи металлического затвора конечных размеров

© Е.А. Левчук, Л.Ф. Макаренко

Белорусский государственный университет,  
220050 Минск, Белоруссия

E-mail: liauchuk@bsu.by

(Получена 12 января 2015 г. Принята к печати 13 мая 2015 г.)

Проведено численное моделирование влияния внешнего электрического поля на состояния мелкого донора, находящегося вблизи поверхности полупроводника. В качестве источника электрического поля рассматривался металлический затвор дискообразной формы. Для нахождения волновых функций и энергий связанных состояний использовался метод конечных элементов. Определены критические характеристики передислокации электрона от донора к затвору с учетом разницы диэлектрических проницаемостей материалов, для различных диаметров затвора, граничных условий. Получены эмпирические зависимости этих характеристик от геометрических параметров и свойств полупроводника. Предложена также пробная функция простого вида, которая может быть использована для расчетов критических параметров с использованием вариационного метода Ритца.

## 1. Введение

Предложенная в работе [1] физическая реализация квантовых вычислений на основе кремния, легированного фосфором, стимулировала появление ряда работ, в которых теоретически изучалось влияние внешнего электрического поля на донорные состояния вблизи поверхности полупроводника (см. [2–9]). Основное внимание в этих работах уделялось управлению электронной плотностью на доноре при помощи внешнего электрического поля, когда расчетной характеристикой рассматриваемых систем являлось критическое поле [5–6] или критический потенциал на затворе  $\Phi_{0c}$  [2], соответствующие передислокации волновой функции донорного электрона в подзатворную область. Другой расчетной характеристикой, которая важна для управления электронной плотностью, является минимальная величина энергетического зазора ( $g_{\min}$ ) между основным и первым возбужденным состояниями электрона. Величина  $g_{\min}$  позволяет оценить время туннелирования электрона от донора к затвору [5,6,10].

Значения  $\Phi_{0c}$  и  $g_{\min}$  зависят от ряда геометрических параметров системы: расстояния от донора до границы полупроводника ( $z_0$ ), диаметра затвора ( $d$ ); а также свойств полупроводника: диэлектрической проницаемости ( $\epsilon_s$ ), эффективной массы электрона ( $m^*$ ) и др. Некоторые из таких зависимостей изучены в работах [2–8], где рассматривались различные частные случаи набора указанных параметров.

Так, в работе [2] исследовано влияние положения донора и размеров затвора на характеристики управления волновой функцией. В работе [3] решалась подобная задача, но уже при другой геометрической конфигурации затвора и других граничных условиях для управляющего внешнего поля. В более поздних работах [4–7] площадь затвора считалась бесконечно большой, что обеспечивало однородное электрическое поле в подзатворной

области. Кроме того, в работах [4–8] в отличие от [2,3] при расчете учитывались дополнительно потенциалы изображения донора и электрона. Таким образом в разных работах модели изучаемой структуры имели довольно существенные различия в наборе учитываемых факторов, что затрудняет количественное сравнение результатов различных работ между собой и не позволяет последовательно проследить влияние тех или иных параметров модели на поведение волновых функций донора, критического потенциала и энергетического зазора.

Цель данной работы заключалась в изучении влияния геометрических параметров структуры металл–полупроводник (размеров затвора, типа граничных условий для электрического потенциала, потенциала изображения) и положения донора на передислокацию волновых функций связанного с донором электрона. Для расчета электронных функций и энергетических уровней в системе затвор–донор использовался метод конечных элементов (МКЭ), который имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционным методом Ритца, к тому же в настоящее время он может быть достаточно просто реализован с использованием имеющихся математических пакетов (см., например, MATLAB [11]).

## 2. Постановка задачи

В настоящей работе так же, как и в [2], рассматривается дискообразный затвор диаметра  $d$ . Область  $z > 0$  заполнена полупроводником с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_s$ , а затвор находится в плоскости  $z = 0$ . Донор расположен на оси затвора на расстоянии  $z_0$  от него. Предполагается, что между затвором и полупроводником расположен диэлектрик с бесконечно малой толщиной ( $t_{ox} \rightarrow 0$ ). Этот слой диэлектрика не влияет на распределение потенциала, но препятствует выходу электрона из полупроводника. При этом предполагается

наличие бесконечно высокого потенциального барьера на границе полупроводника.

В плоскости  $z = 0$  рассматривались два типа граничных условий для электрического потенциала, созданного затвором. В первом случае считалось, что область  $z < 0$  заполнена диэлектриком, толщина затвора полагалась бесконечно малой (случай ВС-А). Такая система рассматривалась ранее в работе [2]. Во втором случае на участке границы  $z = 0$ ,  $\rho > d/2$  потенциал электрического поля полагался равным нулю, т.е. считалось, что затвор окружен заземленным металлическим экраном (случай ВС-В). Граничные условия такого рода использовались ранее в работе [3]. В обоих случаях потенциал на затворе будет обозначаться как  $\Phi_0$ .

Электронные состояния рассматривались в приближении эффективной массы, которая считалась изотропной. Хотя в ряде предыдущих работ рассматривались мелкие доноры в кремнии, который имеет анизотропную эффективную массу и сложную структуру зоны проводимости, тем не менее нам представляется целесообразным вначале рассмотреть более подробно изотропный случай, а влияние особенностей зонной структуры учесть позднее, уже после того, как будут выявлены основные закономерности, обусловленные пространственными характеристиками внешнего поля.

Уравнение Шредингера для волновой функции  $\psi$  и энергии  $E$  электрона для  $\sigma$ -состояний, обладающих цилиндрической симметрией, в общем случае при наличии вблизи границы донорного центра запишется в виде

$$(\hat{T} + \hat{V}_G^{(i)} + \hat{V}_D + \hat{V}_{D'} + \hat{V}_{im})\psi = E\psi, \quad \rho > 0, \quad z > 0, \quad (1)$$

где  $(\rho, z)$  — цилиндрические координаты. Гамильтониан включает в себя следующие слагаемые:  $\hat{T}$  — оператор кинетической энергии:

$$\hat{T} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (2)$$

$\hat{V}_D$  — потенциальная энергия взаимодействия электрона и донора:

$$\hat{V}_D = -\frac{2}{\sqrt{(z - z_0)^2 + \rho^2}}, \quad (3)$$

$\hat{V}_{D'}$  — потенциальная энергия взаимодействия электрона и изображения донора,  $\hat{V}_{im}$  — потенциальная энергия взаимодействия электрона со своим изображением,  $\hat{V}_G^{(i)}$  — потенциальная энергия электрона во внешнем поле с  $i = A, B$  для случаев ВС-А и ВС-В соответственно. Аналитические выражения для  $\hat{V}_G^{(i)}$  приведены в [12–13] (см. также Приложение).

Так как электрон не может проникнуть в область  $z < 0$ , необходимо выполнение граничного условия:

$$\psi|_{z=0} = 0, \quad \rho > 0. \quad (4)$$

Также для связанных состояний выполняются условия:

$$\psi \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0, \quad \psi \xrightarrow{z \rightarrow \infty} 0. \quad (5)$$

Уравнение (1) представлено в безразмерном виде: в качестве единицы измерения расстояний использовался эффективный борковский радиус:

$$a^* = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_s \hbar^2}{m^*e^2}, \quad (6)$$

а энергий — эффективный Ридберг:

$$Ry^* = \frac{\hbar^2}{2m^*(a^*)^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \frac{e^2}{2a^*}, \quad (7)$$

где  $m^*$  — эффективная масса электрона. Потенциал соответственно измерялся в единицах  $Ry^*/e$ .

### 3. Результаты вычислений

#### 3.1. Связанные состояния электрона в поле затвора при бесконечно удаленном доноре

Рассмотрим сначала частный случай задачи (1), (4)–(5), в которой электрон движется только в притягивающем поле затвора, а донор, с которым связан электрон, бесконечно удален от затвора. Тогда влияние электрического потенциала донора можно пренебречь и потенциальную яму вблизи затвора рассматривать как электрически индуцированную квантовую точку, в связи с чем эта задача представляет также самостоятельный интерес [9].

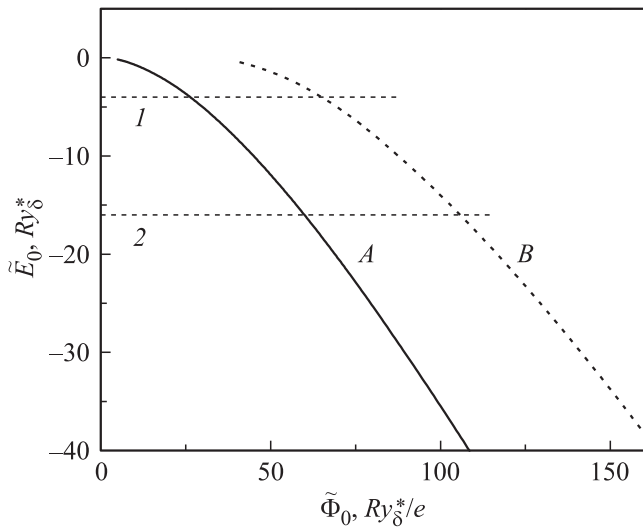
Вначале рассмотрим задачу с бесконечно удаленным донором без учета влияния потенциала изображения. Тогда в уравнении (1) останется лишь один из операторов потенциальной энергии —  $\hat{V}_G^{(i)}$ , который как в случае ВС-А, так и в случае ВС-В представляет собой выражение вида  $\hat{V}_G^{(i)} = \Phi_0 g(d, \rho, z)$ , где функция  $g$  является однородной относительно  $d, \rho, z$ , т.е.  $g(d, \rho, z) = g(1, \rho/d, z/d)$  (см. Приложение). Поэтому естественно в качестве единицы длины выбрать  $d$ , а энергии —  $Ry_\delta^* = Ry^*/\delta^2$ , где  $\delta = d/a^*$ . Потенциал на затворе соответственно будет выражаться в единицах  $Ry_\delta^*/e$ . В результате получим уравнение вида

$$(\hat{T} + \hat{V}_G^{(i)})\psi(\rho, z) = E\psi(\rho, z), \quad \rho > 0, \quad z > 0, \quad (8)$$

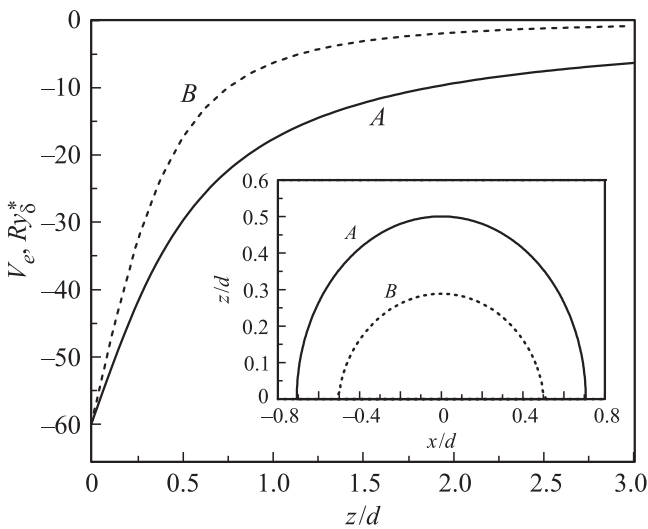
которое является инвариантным относительно диаметра затвора.

Потенциал на затворе, представленный в единицах  $Ry_\delta^*/e$ , будем обозначать как  $\tilde{\Phi}_0$ , энергию основного состояния, выраженную в  $Ry_\delta^*$ , — как  $\tilde{E}_0$ .

Для решения задачи (8) с граничными условиями (4), (5) использовался метод конечных элементов (МКЭ). При этом полупространство  $\rho > 0$ ,  $z > 0$ , в котором определена задача, заменялось ограниченной областью  $0 < \rho < L_\rho$ ,  $0 < z < L_z$ , а волновая функция аппроксимировалась с помощью кусочно-линейных пробных функций на треугольной сетке. Погрешности полученных значений энергий зависят как от выбора  $L_\rho$



**Рис. 1.** Зависимость энергии основного состояния электрона в поле затвора от потенциала на затворе. В качестве единицы длины используется диаметр затвора, а энергий —  $Ry_\delta^* = Ry^*/\delta^2$ . Кривые *A* и *B* относятся к граничным условиям ВС-А и ВС-В соответственно, прямые *1* и *2* соответствуют значению  $\tilde{E}_0 = -\delta^2 Ry_\delta^*$ , где  $\delta = 2$  ( $d = 2a^*$ ) и  $\delta = 4$  ( $d = 4a^*$ ).



**Рис. 2.** Потенциальная энергия электрона в поле затвора в сечении вдоль оси  $\rho = 0$ . На вставке — изолинии для потенциальной энергии электрона в поле затвора, равной  $V_e = -30Ry_\delta^*$ . Потенциал на затворе  $\tilde{\Phi}_0 = 60Ry_\delta^*$ . Кривые *A* и *B* относятся к граничным условиям ВС-А и ВС-В соответственно.

и  $L_z$ , так и от шага сетки. Поэтому при ограничении на число узлов погрешность определения энергии основного состояния  $E_0$  с ростом  $L_p$  и  $L_z$  будет сначала уменьшаться, а затем увеличиваться. В связи с этим при вычислении энергии основного состояния величины  $L_p$  и  $L_z$  выбирались из условия минимума значения  $E_0$ .

Зависимости  $\tilde{E}_0(\tilde{\Phi}_0)$  в случаях ВС-А и ВС-В, полученные с помощью МКЭ, представлены на рис. 1. Из рис. 1

видно влияние граничных условий для электрического потенциала на величину  $\tilde{E}_0$ : в случае ВС-В требуются значительно более высокие значения потенциала внешнего поля для обеспечения той же энергии основного состояния, что и в случае ВС-А. Это вызвано тем, что в случае ВС-В с ростом расстояния до затвора потенциал внешнего поля убывает быстрее, чем в случае ВС-А (рис. 2), поэтому область локализации электрического поля в случае ВС-В имеет меньшие размеры (см. вставку на рис. 2). Как следствие, меньшие размеры имеет и область локализации волновой функции, что приводит к возрастанию вклада кинетической энергии электрона.

Полученные зависимости  $\tilde{E}_0(\tilde{\Phi}_0)$  позволяют оценить критический потенциал для различных диаметров затвора при больших расстояниях от донора до поверхности полупроводника ( $z_0 \rightarrow \infty$ ). Передислокация волновой функции основного состояния от донора к затвору происходит, когда уровень энергии электрона в потенциальной яме затвора (кривые *A* и *B* на рис. 1) оказывается ниже, чем его энергия в потенциальной яме донора, равная  $-1Ry^*$ . Таким образом, критический потенциал может быть определен из рис. 1 по точкам пересечения кривых  $\tilde{E}_0(\tilde{\Phi}_0)$  с прямыми  $E_0 = -1Ry^* = -\delta^2 Ry_\delta^*$  (линии *1* и *2* на рис. 1).

Для диаметров затвора, больших  $6a^*$ , зависимости  $\tilde{E}_0(\tilde{\Phi}_0)$  допускают простую эмпирическую аппроксимацию с помощью степенной функции:

$$\tilde{E}_0(\tilde{\Phi}_0) \approx -0.0802(\tilde{\Phi}_0)^{4/3} \quad (9)$$

в случае ВС-А и

$$\tilde{E}_0(\tilde{\Phi}_0) \approx -0.00833(\tilde{\Phi}_0)^{5/3} \quad (10)$$

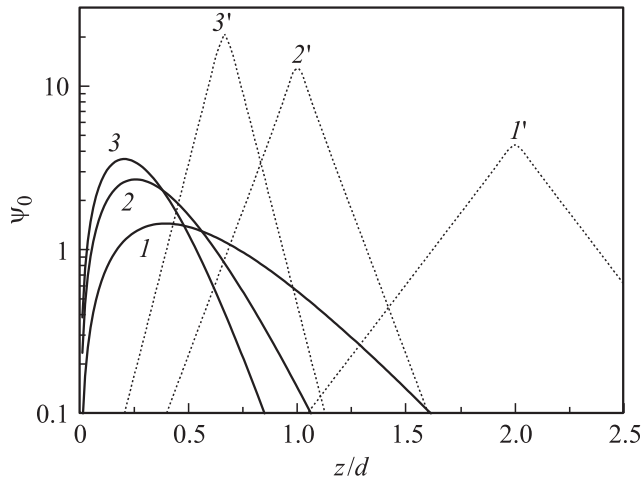
в случае ВС-В. Тогда при  $z_0 \rightarrow \infty$  и  $d \geq 6a^*$  критический потенциал может быть аппроксимирован выражением

$$\Phi_{0c} \approx c\delta^{-\tau}, \quad (11)$$

где  $c = 6.63$ ,  $\tau = 1/2$  для граничных условий ВС-А и  $c = 17.7$ ,  $\tau = 4/5$  для граничных условий ВС-В.

Использование в уравнении (8) единиц  $d$  и  $Ry_\delta^*$  позволяет представить в универсальном, не зависящем от диаметра затвора виде, также и волновые функции электрона в поле затвора  $\psi_G$  (кривые *1–3* на рис. 3). В то же время вид волновых функций водородоподобного донора, описываемых выражением  $\psi_D = \exp(-r/a^*)$  (кривые *1'–3'* на рис. 3), изменяется для различных диаметров затвора, что проявляется в разной степени перекрытия  $\psi_G$  и  $\psi_D$  для разных значений  $d$  при одном и том же положении донора ( $z_0 = \text{const}$ ).

Для качественных исследований поведения волновой функции электрона предпочтительным является использование вариационного метода с небольшим размером базиса. Вариационный метод в такой форме позволяет существенно уменьшить вычислительные затраты и получить более ясную физическую трактовку результатов расчетов. При этом основной проблемой



**Рис. 3.** Нормированные волновые функции основного состояния в сечении вдоль оси  $\rho = 0$ . Кривые  $1, 2, 3$  — волновые функции подзатворного состояния при  $\Phi_0 = 60Ry_s^*$ ,  $\Phi_0 = 150Ry_s^*$  и  $\Phi_0 = 260Ry_s^*$ , которые равны приближенным значениям критического потенциала для  $d = 4a^*$ ,  $d = 8a^*$  и  $d = 12a^*$ . Кривые  $1', 2', 3'$  — волновые функции основного состояния электрона, связанного с донором, в отсутствие внешнего поля при  $z_0 = 8a^*$ . Для функций  $1, 1'$  —  $d = 4a^*$ ,  $2, 2'$  —  $d = 8a^*$ ,  $3, 3'$  —  $d = 12a^*$ .

является оптимальный выбор пробной функции. Для описания подзатворных состояний ранее использовались функции, содержащие гауссианы [2] либо комбинации экспоненциальных функций и гауссиан [5,6]. При этом вариационные параметры могут входить в пробные функции как нелинейно (например, в [5–6], где они присутствовали в показателях экспонент и гауссиан), так и линейно. Последний вариант построения пробных функций использовался в [2], где для аппроксимации подзатворных состояний использовалась линейная комбинация 25 базисных функций. Нами установлено, что для решения задачи (8), (4)–(5) в случае ВС-А хорошим приближением является пробная функция вида

$$\psi_G(\rho, z) = N_G z (e^{-\alpha_1 \rho^2 - \beta_1 z^2} + C_r e^{-\alpha_2 \rho^2 - \beta_2 z^2}) \quad (12)$$

с вариационными параметрами  $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$  и  $C_r$ , изменяющимися в зависимости от потенциала на затворе  $\tilde{\Phi}_0$ . Множитель  $z$  обеспечивает выполнение граничного условия (4),  $N_G$  — постоянная нормировки. Параметры  $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$  выбирались из условия минимизации энергии основного состояния с помощью метода Нелдера–Мида. Когда  $\tilde{\Phi}_0$  находится в интервале от 30 до 320, зависимости  $\alpha_1, \beta_1, \beta_2$  от потенциала на затворе хорошо аппроксимируются линейными функциями. Для произвольных диаметров затвора эти зависимости имеют вид

$$\alpha_1 = \beta_1 = -0.266/\delta^2 + 0.0275\Phi_0, \quad (13)$$

$$\beta_2 = 0.256/\delta^2 + 0.0731\Phi_0. \quad (14)$$

Параметр  $\alpha_2$  можно аппроксимировать как

$$\alpha_2 = (0.8 - 0.00172 \Phi_0 \delta^2) \cdot \beta_2. \quad (15)$$

В случае такой аппроксимации параметров  $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$  коэффициент  $C_r$  в функции (12) выражается как

$$C_r = \begin{cases} 2, & 30/\delta^2 < \Phi_0 < 80/\delta^2 \\ 2.33 - 0.00442 \Phi_0 \delta^2, & \Phi_0 \geq 80/\delta^2. \end{cases} \quad (16)$$

Качество пробной функции (12) с параметрами (13)–(15) оценивалось путем сравнения энергий основного состояния, полученных вариационным методом, с соответствующими значениями, вычисленными с помощью МКЭ. Относительная разница энергий составила не более 1%, что является вполне приемлемым для последующего использования в рассматриваемой модели.

Оценим теперь, какое влияние заряды изображения оказывают на энергию основного состояния. Для бесконечно удаленного донора это будет только энергия взаимодействия электрона со своим изображением, которая в обезразмеренной форме определяется выражением (см., например, [5–6,8])

$$\hat{V}_{im} = \frac{Q^*}{2z}. \quad (17)$$

Равенство (17) записано с использованием параметров обезразмеривания  $a^*$  для длины и  $Ry^*$  для энергии. Множитель  $Q^*$  определяется диэлектрическими проницаемостями двух граничащих сред:

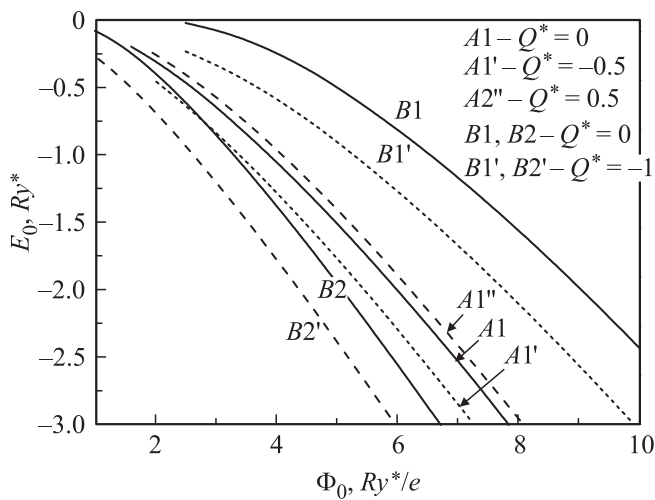
$$Q^* = \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ins}}{\epsilon_s + \epsilon_{ins}},$$

$\epsilon_{ins}$  — диэлектрическая проницаемость среды в области  $z < 0$ . Для границы металл–полупроводник имеем  $\epsilon_{ins} \rightarrow +\infty$  и  $Q^* = -1$ .

Как видно из (1) и (17), если мы выберем в качестве единиц длины диаметр затвора, то получим  $\hat{V}_{im} = \delta \tilde{V}_{im}$ . Поэтому при расчетах влияния потенциала изображения мы использовали исходные параметры обезразмеривания  $a^*$  и  $Ry^*$ , а не  $d$  и  $Ry_d^*$ . В этом случае зависимости  $E_0$  от  $\tilde{\Phi}_0$  для разных диаметров затвора будут различаться (см. кривые  $B1, B2$  на рис. 4). Пересчет этих зависимостей из данных, представленных на рис. 1, осуществляется по формуле

$$E_0(\Phi_0) = \tilde{E}_0(\delta^2 \tilde{\Phi}_0)/\delta^2. \quad (18)$$

При численном моделировании в случае ВС-А выберем в качестве полупроводника кремний с  $\epsilon_s = 11.4$  и рассмотрим два варианта выбора диэлектрика. В первом варианте диэлектриком является двуокись кремния с  $\epsilon_{ins} = 3.8$  и  $Q^* = 0.5$ , во втором — диэлектрик с  $\epsilon_{ins} = 3\epsilon_s$  и  $Q^* = -0.5$  (примером диэлектрика с высокой проницаемостью может служить двуокись гафния [14]). В случае ВС-В имеет место только случай



**Рис. 4.** Энергия основного состояния электрона в поле затвора как функция  $\Phi_0$  в единицах  $Ry^*$ . Кривые  $A1, A1', A1''$  относятся к случаю граничных условий ВС-А с  $d = 4a^*$ , кривые  $B1, B2, B1', B2'$  — к случаю граничных условий ВС-В. Диаметр затвора  $d = 4a^*$  для  $B1, B1'$  и  $d = 8a^*$  для  $B2, B2'$ .

$Q^* = -1$  (граница полупроводник-металл). Результаты расчетов приведены на рис. 4.

Как следует из приведенных данных, учет потенциала изображения качественно не меняет характера зависимости  $E_0(\Phi_0)$ , хотя для небольших значений  $\Phi_0$  относительный вклад изображения может быть достаточно велик (энергии основного состояния могут отличаться в 10 раз). При больших  $\Phi_0$  относительное изменение энергии уже не столь заметно (десять процентов). Так как учет изображения не приводит к качественным изменениям, в дальнейшем потенциал изображения можно рассматривать как некоторую поправку, а все вычисления будем проводить, предполагая  $\tilde{V}_{D'} = 0, \tilde{V}_{im} = 0$ .

Для бесконечно удаленного донора второй критический параметр  $g_{min}$  равен нулю. Как показано в [10], этот параметр связан с вероятностью туннелирования между двумя потенциальными ямами (донором и затвором). Очевидно, что в этом случае эта вероятность стремится к нулю. С уменьшением расстояния от донора до затвора величина  $g_{min}$  будет возрастать. Зависимость  $g_{min}(z_0)$  исследована в следующем разделе.

### 3.2. Состояния электрона в системе донор-затвор при конечном расстоянии от донора до затвора

В отличие от случая бесконечно удаленного донора, когда потенциальные ямы можно рассматривать изолированно друг от друга, при конечных  $z_0$  на электрон одновременно действует как потенциал донора, так и потенциал затвора, что приводит к уменьшению энергии стационарных состояний. Это различие иллюстрирует рис. 5, на котором изображены энергии основного ( $E_0$ ) и первого возбужденного ( $E_1$ ) состояний, вычисленные

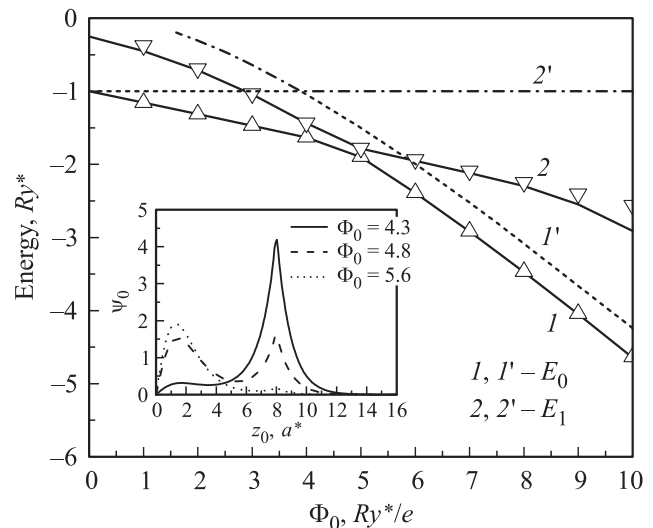
с помощью МКЭ, для  $z_0 \rightarrow \infty$  и  $z_0 = 8a^*$ . Дополнительный вклад потенциала затвора приводит к постепенному уменьшению энергии электрона, связанного с донором, при увеличении  $\Phi_0$ , в то время как энергия изолированного донора при  $z_0 \rightarrow \infty$  остается постоянной с ростом  $\Phi_0$ . Разница же энергий подзатворных состояний для случаев  $z_0 \rightarrow \infty$  и конечного значения  $z_0$  практически не зависит от потенциала на затворе, так как остается постоянным вклад потенциала донора в суммарную потенциальную энергию электрона вблизи затвора.

При  $z_0 \rightarrow \infty$  зависимости  $E_0$  и  $E_1$  имеют общую точку ( $g_{min} = 0$ ), по положению которой и определяется критический потенциал. Для конечных значений  $z_0$  с ростом  $\Phi_0$  наблюдается явление антипересечения энергетических уровней [15] (рис. 5), и значение критического потенциала определяется путем нахождения минимума разности  $E_1 - E_0$  (см. [6]). При  $\Phi_0 < \Phi_{0c}$  вероятность нахождения электрона вблизи донора выше, чем вблизи затвора, а при  $\Phi_0 > \Phi_{0c}$  происходит постепенная передислокация электрона к затвору (см. вставку на рис. 5).

Помимо определения минимума разности  $E_1 - E_0$ , еще один способ вычисления  $\Phi_{0c}$  дает вариационный метод с пробной функцией, представляющей собой линейную комбинацию двух функций:

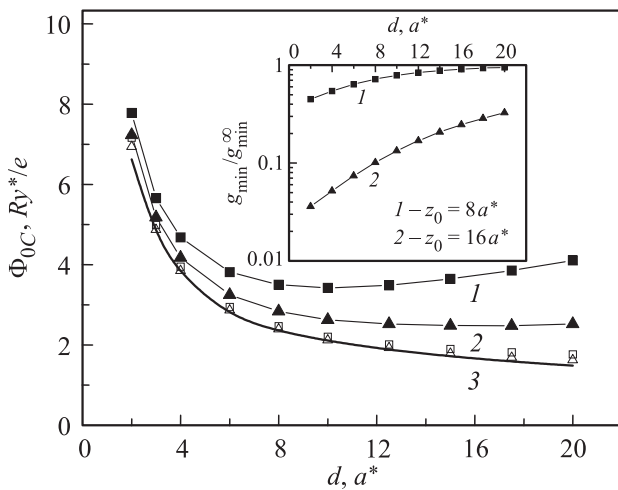
$$\psi_{\Sigma} = C_G \psi_G + C_D \psi_D, \quad (19)$$

где  $\psi_G$  представляет собой волновую функцию основного состояния в потенциальной яме затвора,  $\psi_D$  — в потенциальной яме донора. Тогда критический потенциал соответствует точке, в которой  $C_G = C_D$ .



**Рис. 5.** Зависимости энергий основного и первого возбужденного состояний от потенциала на затворе при граничных условиях ВС-А для бесконечно удаленного донора (кривые  $1', 2'$ ) и для  $z_0 = 8a^*$  (кривые  $1, 2$ );  $d = 4a^*$ . На вставке показаны нормированные функции основного состояния для различных значений потенциала на затворе,  $d = 4a^*$ ,  $z_0 = 8a^*$ , граничные условия ВС-А.





**Рис. 6.** Зависимость критического потенциала от диаметра затвора в случае, когда область  $z < 0$  заполнена диэлектриком. Кривая 3 определена с помощью формулы (11) и рис. 1, кривые 1 и 2 — как минимум разности  $E_1 - E_0$ . Незаполненными треугольниками и квадратами обозначены значения критической разности потенциалов для  $z_0 = 16a^*$  и  $z_0 = 8a^*$  соответственно. На вставке показана зависимость отношения величины энергетического зазора для конечного диаметра затвора к величине зазора для однородного поля от диаметра затвора.

Для расчетов в случае ВС-А и без учета влияния потенциала изображения ( $\hat{V}_{D'} = 0, \hat{V}_{im} = 0$ ) в (19) в качестве  $\psi_G$  использовалась функция (12) с параметрами (13)–(16). Функция  $\psi_D$  полагалась равной  $N_D \exp(-\alpha \sqrt{(z - z_0)^2 + \rho^2})$ , где  $N_D$  — нормировочный множитель,  $\alpha$  — вариационный параметр. Путем численных экспериментов было выяснено, что варьирование параметра  $\alpha$  не приводит к существенному уменьшению погрешности вычисления энергии, поэтому в дальнейшем использовалось значение  $\alpha = 1$ .

Результаты расчетов для энергий основного и первого возбужденного состояний с использованием пробной функции (19) представлены на рис. 5 (треугольники). Сравнение со значениями, полученными с помощью МКЭ (линии), показывает, что пробная функция (19) дает хорошее приближение для  $E_0$  и  $E_1$  при относительно небольших потенциалах на затворе. В то же время при более высоких значениях  $\Phi_0$  данная пробная функция не подходит для определения  $E_1$ . Как следует из расчетов методом конечных элементов, при таких значениях  $\Phi_0$  на волновой функции первого возбужденного состояния появляются дополнительные локальные экстремумы вне оси симметрии, что не учитывает функция (19).

Представляется интересным изучить зависимость критического потенциала и энергетического зазора от геометрических параметров системы. Зависимости  $\Phi_{0C}$  от диаметра затвора, вычисленные с использованием МКЭ, приведены на рис. 6. Как видно из рисунка, с ростом диаметра затвора значение  $\Phi_{0C}$  сначала умень-

шается, а затем, начиная с некоторого  $d$ , происходит его некоторое увеличение. Начальное падение  $\Phi_{0C}$  с ростом диаметра затвора, обнаруженное ранее в [2], связано с расширением области локализации волновой функции вблизи затвора, что приводит к уменьшению кинетической энергии электрона. Возрастание  $\Phi_{0C}(d)$  можно объяснить, если принять во внимание увеличение степени перекрытия волновых функций  $\psi_G$  и  $\psi_D$  с ростом диаметра затвора (рис. 3). Очевидно, что с возрастанием  $z_0$  подъем  $\Phi_{0C}$  будет появляться при более высоких значениях диаметра затвора.

Отметим, что приведенные на рис. 6 зависимости будут иметь более универсальный характер, если в качестве управляющего параметра рассматривать не потенциал на затворе, а разность потенциалов  $\Delta\Phi = \Phi_0 - \Phi(0, z_0)$ , где  $\Phi(\rho, z)$  — функция распределения потенциала, созданного затвором. Тогда вместо критического потенциала будем рассматривать критическую разность потенциалов  $\Delta\Phi_C$ . Как видно из рис. 6, критическая разность потенциалов практически не будет зависеть от положения донора, а формула (11) становится применимой для любых  $z_0$  при замене  $\Phi_{0C}$  на  $\Delta\Phi_C$  (очевидно, что для бесконечно удаленного донора  $\Phi_{0C}$  и  $\Delta\Phi_C$  совпадают).

Величина энергетического зазора между основным и первым возбужденным состояниями связана с перекрытием волновых функций затвора и донора ( $\psi_G$  и  $\psi_D$  в представлении (19)) при критическом потенциале  $\Phi_{0C}$ , и поэтому  $g_{min}$  должно сильно зависеть от расстояния между донором и затвором. Как показано на рис. 3, увеличение перекрытия  $\psi_G$  и  $\psi_D$  происходит и при увеличении диаметра затвора, вследствие чего увеличивается и  $g_{min}$  (см. вставку на рис. 6). Когда диаметр затвора существенно больше  $z_0$  и значения эффективного боровского радиуса, поле затвора можно считать однородным, а зависимость  $g_{min}^\infty$  (величины зазора при однородном внешнем поле) от  $z_0$  может быть аппроксимирована выражением

$$g_{min}^\infty = a \exp(-\sigma z_0), \quad (20)$$

где  $a = 5.6$  и  $\sigma = 0.5$ . Формула (20) остается справедливой и при меньших размерах затвора, когда внешнее поле уже нельзя считать однородным, однако в этом случае параметры  $a$  и  $\sigma$  зависят от  $d$  (см. вставку на рис. 6).

#### 4. Влияние параметров полупроводника на управляющие характеристики структуры

Выражения (11) и (20) позволяют оценить величины  $\Phi_{0C}$  и  $g_{min}$  для различных диаметров затвора и состояниях от донора до поверхности полупроводника, выраженных в эффективных боровских радиусах  $a^*$ . При этом рассчитанные величины будут выражаться в  $R_{y^*}/e$  и  $R_{y^*}$ . Полученные значения для критического

Значения критического потенциала и минимальной величины энергетического зазора для полупроводников с различными эффективными массами

	$a^*$ , нм	$Ry^*$ , мэВ	$z_0 = 40 \text{ нм} / d = 40 \text{ нм}$		$z_0 = 40 \text{ нм} / d = 20 \text{ нм}$	
			$\Phi_{0C}$ , мВ	$g_{\min}$ , мэВ	$\Phi_{0C}$ , мВ	$g_{\min}$ , мэВ
GaAs	10.8	5.15	29.5	6.71	42.1	6.21
$Al_{0.4}Ga_{0.6}As$	6.5	9.37	35.5	2.16	52.6	1.83
$Si^*$	3.16	19.98	52.8	0.081	62.4	0.043
$Si^{**}$	2.0	31.27	65.8	$2.65 \cdot 10^{-3}$	77.7	$7.29 \cdot 10^{-4}$

потенциала совпадают с результатами работы [2], где были проведены расчеты для относительно небольших диаметров затвора. В других работах исследовался только случай затвора бесконечной площади.

Отметим, что для разных полупроводников величины  $a^*$  и  $Ry^*$  могут отличаться в несколько раз, но различия для критических потенциалов будут не столь существенны. Приведем результат некоторых численных оценок. В качестве примера рассмотрим четыре полупроводника: GaAs,  $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$  и два варианта „изотропного“ Si. Первый вариант ( $Si^*$ ) определим как полупроводник с изотропной массой, равной поперечной массе электронов проводимости Si ( $m^* = m_{\perp} = 0.191m_0$ ). Вторым вариантом ( $Si^{**}$ ) выберем из условия равенства  $Ry^*$  теоретическому значению энергии связи водородоподобного донора  $E_{BH} = 31.3 \text{ мэВ}$  [16]. В обоих вариантах будем считать диэлектрическую постоянную такой же, как и для кристалла Si ( $\epsilon_s = 11.4$ ). В первом варианте получим  $a^* = 3.16 \text{ нм}$  и  $Ry^* = 19.98 \text{ мэВ}$ , а во втором варианте —  $a^* = 2 \text{ нм}$ ,  $Ry^* = 31.3 \text{ мэВ}$ . Все четыре материала имеют близкие значения относительной диэлектрической постоянной  $\epsilon_s = 12 \pm 1$ , но сильно различающиеся эффективные массы:  $0.063m_0$ ,  $0.096m_0$ ,  $0.191m_0$ ,  $0.3m_0$  для GaAs,  $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ ,  $Si^*$  и  $Si^{**}$  соответственно [17].

Результаты численных оценок для двух значений  $z_0$  приведены в таблице. Расстояние от донора до затвора выбрано равным  $z_0 = 40 \text{ нм}$ , что соответствует  $\sim 2a^*$ ,  $\sim 6a^*$ ,  $\sim 13a^*$  и  $\sim 20a^*$  для GaAs,  $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ ,  $Si^*$  и  $Si^{**}$ . При более близком расположении донора к затвору определение критического потенциала для случая GaAs затруднительно. Как следует из таблицы, при одинаковых диаметрах затвора и расстояниях от донора до границы наиболее сильно для разных полупроводников изменяется величина энергетического зазора.

Если же рассчитать  $\Phi_{0C}$  для  $Si^*$  и  $Si^{**}$  при  $z_0 = 20 \text{ нм}$  (такое значение  $z_0$  предлагалось для кубитов в работе [1]), то получим приблизительно одинаковые значения  $\Phi_{0C} \approx (110 \pm 10) \text{ мВ}$  для  $Si^{**}$  и  $Si^*$  при  $d = 10 \text{ нм}$ . Но при этом величины  $g_{\min}$  будут отличаться более чем в 8 раз. Поскольку реальные величины энергии связи доноров в кремнии выше теоретически рассчитанных, значения, приведенные в таблице, являются нижней оценкой для критического потенциала.

Функциональную зависимость  $\Phi_{0C}$  от величины эффективной массы полупроводника можно получить из выражения (11) для случая  $d \geq 6a^*$ . Так, из (11) следует, что для полупроводников, характеризующихся эффективными массами  $m_1^*$  и  $m_2^*$ , будет выполняться соотношение

$$\eta = \frac{\Phi_{0C}^{(1)}}{\Phi_{0C}^{(2)}} \approx \left( \frac{m_1^*}{m_2^*} \right)^{1-\tau}, \quad (21)$$

где  $\tau$  есть величина, определенная в (11) для разных граничных условий. Из выражения (20), в случае  $d \rightarrow \infty$ , когда внешнее электрическое поле в области локализации волновой функции близко к однородному, следует, что

$$g_{\min} \approx bm^* \exp(-k\tilde{z}_0m^*), \quad (22)$$

где  $b$  и  $k$  — некоторые константы,  $\tilde{z}_0$  — расстояние от донора до затвора, выраженное в единицах СИ. Выражение (22) может служить верхней границей для  $g_{\min}$  при конечных диаметрах затвора (см. вставку на рис. 6).

Отметим еще одно применение формулы (11): она позволяет оценить величины электрических полей вблизи затвора при потенциале на затворе, равном  $\Phi_{0C}$ . Поскольку максимальное значение электрического поля в рассматриваемой структуре не должно превышать поле пробоя полупроводника, формула (11) позволяет оценить минимально допустимые диаметры затвора. Пренебрегая граничными эффектами, можно считать, что максимальное значение поля достигается в точке с координатами  $z = \rho = 0$ . Тогда получаем (в безразмерных единицах)

$$d > \left( \frac{E_{BD}}{8.44} \right)^{-2/3} \quad (23)$$

в случае ВС-А и

$$d > \left( \frac{E_{BD}}{35.4} \right)^{-5/9} \quad (24)$$

в случае ВС-В, где  $E_{BD}$  — поле пробоя полупроводника. Для  $Si^*$ , например, минимально допустимый диаметр затвора будет  $d_{\min} \approx 1.5a^*$  и  $d_{\min} \approx 3.1a^*$ , а для  $Si^{**}$  —  $d_{\min} \approx 2.7a^*$  и  $d_{\min} \approx 5.1a^*$  для случаев ВС-А и ВС-В соответственно ( $E_{BD} = 3 \cdot 10^7 \text{ В/м}$ ). Эти значения близки

к геометрическим размерам управляющих электродов, предложенным для кубитов в работе [1], и, следовательно, такие ограничения на минимально допустимые размеры управляющих электродов необходимо принимать во внимание при оценке возможности реализации систем, в которых предполагается использование эффекта передислокации волновых функций электрона между донором и затвором.

## 5. Заключение

В работе проведено численное моделирование влияния электрического поля, создаваемого дискообразным металлическим электродом (затвором), на волновую функцию электрона, связанного с донором. На основании результатов расчетов с использованием метода конечных элементов предложена пробная функция, описывающая электронные состояния в электрическом поле затвора. Получены эмпирические формулы, позволяющие установить связь критических характеристик внешнего поля с геометрическими параметрами структуры. Результаты расчетов могут быть использованы при оценке возможности создания наноприборов, использующих управление электронными состояниями мелкого донора.

## Приложение

В случае, когда область  $z < 0$  заполнена диэлектриком,  $\hat{V}_G^{(i)}$  определяется согласно [12] следующим образом:

$$\hat{V}_G^{(A)} = -\frac{2\Phi_0}{\pi} \times \arctg\left(\frac{d}{2} \sqrt{\frac{2}{\rho^2 + z^2 - \frac{d^2}{4} + ((\rho^2 + z^2 - \frac{d^2}{4})^2 + d^2 z^2)^{1/2}}}\right). \quad (\text{П.1})$$

Если же диск окружен заземленным экраном, то согласно [13] имеем

$$\hat{V}_G^{(B)} = -\Phi_0 \left(1 - \frac{z}{\pi \sqrt{z^2 + (\rho + \frac{d}{2})^2}} \times \left(\frac{a - \frac{d}{2}}{a + \rho} \Pi\left(\frac{\pi}{2}, n_1, k\right) + \frac{a + \frac{d}{2}}{a - \rho} \Pi\left(\frac{\pi}{2}, n_2, k\right)\right)\right), \quad (\text{П.2})$$

где

$$a = \sqrt{z^2 + \rho^2}, \quad n_1 = -\frac{2\rho}{a + \rho}, \quad n_2 = \frac{2\rho}{a - \rho},$$

$$k^2 = \frac{2d\rho}{z^2 + (\rho + \frac{d}{2})^2}.$$

$\Pi(\pi/2, n, k)$  — полный эллиптический интеграл третьего рода:

$$\Pi\left(\frac{\pi}{2}, n, k\right) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\varphi}{(1 + n \sin^2 \varphi) \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}}.$$

## Список литературы

- [1] B.E. Kane. Nature (London), **393**, 133 (1998).
- [2] G.D.J. Smit, S. Rogge, J. Caro, T.M. Klapwijk. Phys. Rev. B, **68**, 193 302 (2003).
- [3] L. M. Kettle et al. Phys. Rev. B, **68**, 075 317 (2003).
- [4] D.B. Mac Millen, U. Landman. Phys. Rev. B, **29**, 4524 (1984).
- [5] M. J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma. Phys. Rev. Lett., **96**, 096 802 (2006).
- [6] M. J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma. Phys. Rev. B, **75**, 125 311 (2007).
- [7] A.F. Slachmuylders, B. Partoens, F.M. Peeters, W. Magnus. Appl. Phys. Lett., **92**, 083 104 (2008).
- [8] Y.L. Hao, A.P. Djotyan, A.A. Avetisyan, F.M. Peeters. Phys. Rev. B, **80**, 035 329 (2009).
- [9] В.А. Николюк, И.В. Игнатъев. ФТП, **41** (12), 1443 (2007).
- [10] A.S. Martins, R.B. Capaz, B. Koiller. Phys. Rev. B, **69**, 085 320 (2004).
- [11] <http://www.mathworks.com/products/matlab/>
- [12] В. Смайг. *Электростатика и электродинамика* (М., Изд-во иностр. лит., 1954).
- [13] Н.Н. Миролобов, М.В. Костенко, М.Л. Левинштейн, Н.Н. Тиходеев. *Методы расчета электростатических полей* (М., Высш. шк., 1963).
- [14] G.M. Rignanese. J. Phys.: Condens. Matter, **17** (7), R357 (2005).
- [15] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (М., Наука, 1989).
- [16] R.A. Faulkner. Phys. Rev., **184**, 713 (1969).
- [17] <http://www.matprop.ru/>

Редактор Т.А. Полянская

## Control of electronic states for shallow donors with a metallic gate of finite size

E.A. Levchuk, L.F. Makarenko

Belarusian State University,  
220050 Minsk, Belarus

**Abstract** Numerical simulations of the effect of external electric field on the states of shallow donor located near the surface of semiconductor are carried out. A metallic discshaped gate is considered as a source of the external electric field. The wave functions and energies of bound states are calculated using the finite element method. Critical characteristics of electron shuttling between the donor and the gate are determined for different gate diameters, boundary conditions for electric potential, taking into account dielectric mismatch. Empirical dependences of these characteristics on geometrical parameters and semiconductor properties are obtained. A trial wave function of a simple form is also proposed. This function allows to calculate critical parameters by the Ritz variational method.