

## УПРАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ МЕЛКОГО ДОНОРА В МДП-СТРУКТУРЕ

Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко

*Белорусский государственный университет, liauchuk.alena@gmail.com*

Управление волновыми функциями локализованных электронов в полупроводниках играет важную роль для функционирования многих наноэлектронных устройств [1,2]. Основу таких устройств могут составлять как квантовые точки, так и одиночные примеси. В частности, система на основе массива одиночных доноров была предложена для реализации квантового компьютера [1]. В связи с тем, что в настоящее время возможно создание систем с достаточно точным расположением донорных примесей [3], моделирование состояний одиночного приповерхностного донора приобретает практическое значение. Ранее в [4] изучалось влияние однородного электрического поля на донор, расположенный вблизи границы полупроводник-диэлектрик. Состояния же донорного электрона в МДП-структуре с конечной толщиной диэлектрика изучались только при отсутствии внешнего электрического поля. В данной работе исследуется влияние слоя диэлектрика конечной толщины на управление состояниями одиночного донора с помощью электрического поля дискообразного металлического затвора.

Рассмотрим донор, находящийся в полупроводнике на расстоянии  $z_0$  от границы раздела полупроводник-диэлектрик. Внешнее электрическое поле создается тонким дискообразным затвором диаметра  $d$ , заряженного до потенциала  $\Phi_0$ . Слой диэлектрика, отделяющий затвор от полупроводника, расположен в области  $-t_{ox} < z < 0$ . Донор и центр затвора расположены на оси  $Oz$ .

В рамках приближения эффективной массы энергия  $E$  и волновая функция электрона  $\Psi$  описываются задачей для стационарного уравнения Шредингера:

$$\left(-\nabla^2 + \hat{V}_D + \hat{V}_{D'} + \hat{V}_{sim} + \hat{V}_G\right)\Psi = E\Psi, \quad \rho > 0, \quad z > 0, \quad (1)$$

где  $\hat{V}_D$  – оператор взаимодействия между электроном и донором,  $\hat{V}_{D'}$ ,  $\hat{V}_{sim}$  – операторы взаимодействия электрона с изображениями донора и электрона соответственно:

$$\hat{V}_{D'} = -\frac{2Q^*}{\sqrt{(z+z_0)^2 + \rho^2}} + \frac{8\varepsilon_1\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(P^*)^{k-1}}{\sqrt{(z+z_0+2kt_{ox})^2 + \rho^2}}, \quad (2)$$

$$\hat{V}_{sim} = \frac{Q^*}{2z} - \frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(P^*)^{k-1}}{z + kt_{ox}}, \quad (3)$$

где диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  равна  $\varepsilon_1$  в полупроводнике,  $\varepsilon_2$  – в диэлектрике

и  $\varepsilon_3$  – в области  $z < -t_{ox}$ ,  $Q^* = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$ ;  $P^* = Q^* \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2}$ . (4)

Везде далее будем полагать  $\varepsilon_1 = 11.4$ ,  $\varepsilon_3 = 1$ . Оператор  $\hat{V}_G = -\varphi_G(\rho, z)$  описывает влияние внешнего поля затвора, где  $\varphi_G$  является решением следующей задачи:

$$\begin{aligned} \nabla(\varepsilon \nabla \varphi_G) &= 0, & \rho > 0, & -\infty < z < +\infty, \\ \varphi_G|_{z=-t_{ox}} &= \Phi_0 & \text{при} & \rho < d/2. \end{aligned} \quad (5)$$

Выражения (1)–(5) приведены с использованием в качестве единицы длины эффективного боровского радиуса ( $a^*$ ) и единицы энергии – эффективного Ридберга ( $Ry^*$ ).

Задача (5) и задача для уравнения (1) решались с помощью метода конечных элементов. При этом неограниченные области задания исходных уравнений заменялись ограниченными областями.

Вначале был проведен расчет влияния величины  $Q^*$  (т.е. соотношения диэлектрической проницаемости полупроводника и среды в области  $z < 0$ ) на энергии и волновые функции электрона при бесконечно удаленном доноре и  $t_{ox} = 0$ . На рисунке 1 приведены электронные плотности четырех низших состояний для  $Q^* = 0$  (область  $z < 0$  заполнена тем же материалом, что и область  $z > 0$ ),  $Q^* = 0.84$  (область  $z < 0$  заполнена вакуумом) и  $Q^* = -1$  (область  $z < 0$  заполнена металлом). Как видно из рисунка, изменение  $Q^*$  в этих пределах не оказывает качественного влияния на взаимное расположение экстремумов волновой функции.

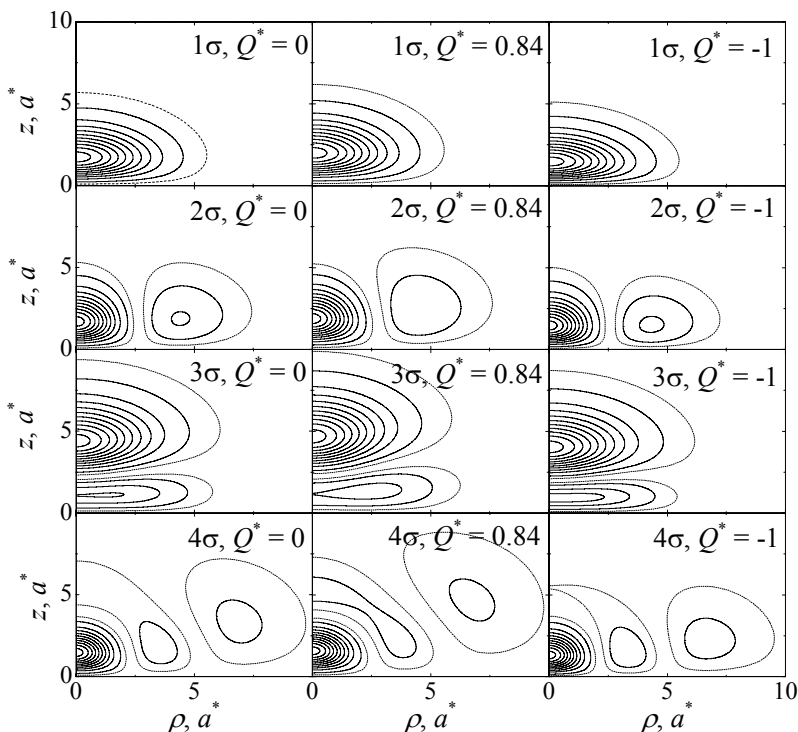
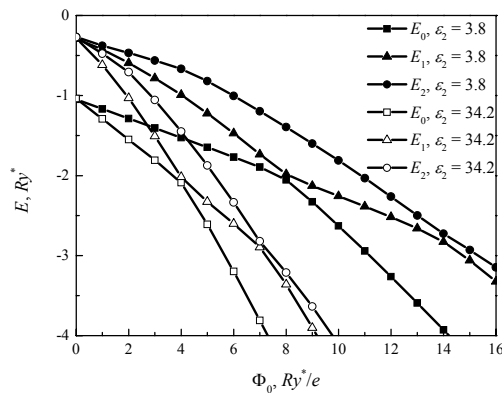


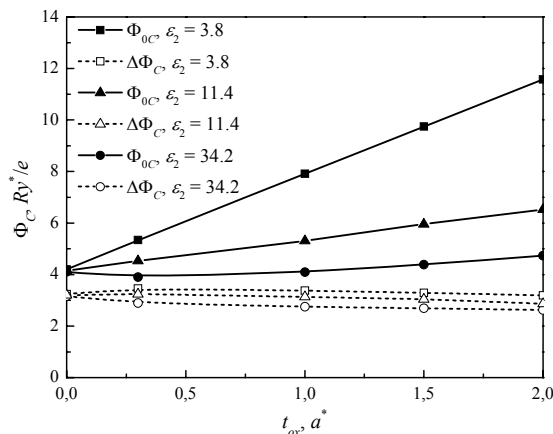
Рисунок 1. – Электронные плотности основного (1σ), первого (2σ), второго (3σ) и третьего (4σ) возбужденных состояний для различных значений диэлектрической проницаемости в области  $z < 0$  при  $t_{ox} = 0$  и бесконечно удаленном доноре.

Пунктирная линия соответствует значению 0,01; сплошные линии соответствуют значениям от 0,05 до 0,95 с шагом 0,1;  $d = 10a^*$ ,  $\Phi_0 = 4Ry^*/e$

На рисунке 2 приведена зависимость энергий основного, первого и второго возбужденных состояний от потенциала на затворе в случае конечного расстояния между донором и затвором для  $\epsilon_2 = 3,8$  ( $Q^* = 0,5$ ) и  $\epsilon_2 = 34,2$  ( $Q^* = -0,5$ ). Эти зависимости позволяют определить критический потенциал  $\Phi_{0C}$ , минимизирующий разность  $E_1 - E_0$  и равный потенциалу, при котором происходит переход максимума модуля электронной волновой функции основного состояния от донора к поверхности полупроводника. Полученная таким образом зависимость  $\Phi_{0C}$  от толщины слоя диэлектрика  $t_{ox}$  приведена на рисунке 3. Было установлено, что более удобной величиной для описания системы является не критический потенциал затвора, а критическая разность потенциалов между точкой расположения донора и поверхностью полупроводника ( $\Delta\Phi_C$ ). Зависимость  $\Delta\Phi_C$  от  $t_{ox}$  также изображена на рисунке 3. Как видно из рисунка, критическая разность потенциалов практически не зависит от толщины и материала диэлектрика.



**Рисунок 2.** – Зависимость энергий основного ( $E_0$ ), первого ( $E_1$ ) и второго ( $E_2$ ) возбужденных состояний от потенциала на затворе для различных значений  $\epsilon_2$ ,  $d = 6a^*$ ,  $z_0 = 8a^*$ ,  $t_{ox} = 1a^*$



**Рисунок 3.** – Зависимость критического потенциала ( $\Phi_{0C}$ ) критической разности потенциалов ( $\Delta\Phi_C$ ) от толщины диэлектрика для различных значений проницаемости слоя диэлектрика;  $d = 6a^*$ ,  $z_0 = 8a^*$

Величина электрической проницаемости слоя диэлектрика изменяет величину потенциала на поверхности полупроводника для одинаковых значений  $\Phi_0$ : потенциал на поверхности для  $\epsilon_2 = 34,2$  в 1,7 раз больше, чем для  $\epsilon_2 = 3,8$ . Это приводит к значительному росту критического потенциала для малых  $\epsilon_2$  (рисунок 3), например, при  $t_{ox} = 2a^*$  ( $\approx 6.3$  нм в кремнии)  $\Phi_{0C} \approx 231$  мВ для  $\epsilon_2 = 3,8$  и  $\Phi_{0C} \approx 95$  мВ для  $\epsilon_2 = 34,2$ . Это обстоятельство необходимо учитывать при расчете вероятности пробоя диэлектрика в поле затвора.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Koenraad, P.M. Single dopants in semiconductors / P.M. Koenraad, M.E. Flatte // Nature materials. - 2011. - Vol. 10, № 2. - P. 91-100.
2. Charge state control and relaxation in an atomically doped silicon device / S.E.S. Andresen [et al.] // Nano Letters. - 2007. - Vol. 7, № 7. - P. 2000-2003.
3. Enhancing semiconductor device performance using ordered dopant arrays / T. Shinada [et al.] // Nature. - 2005. - Vol. 437, № 7062. - P. 1128-1131.
4. Calderon, M.J. External field control of donor electron exchange at the Si/SiO<sub>2</sub> interface / M.J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Physical Review B. - 2007. - Vol. 75. - P. 125311.

## ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ ОТКЛИК СИСТЕМЫ ИЗ ДВУХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ СВЯЗАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В МИКРОВОЛНОВОМ И ТЕРАГЕРЦОВОМ ЧАСТОТНЫХ ДИАПАЗОНАХ

**А. В. Мельников**

---

*НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета,  
Alexander.Melnikov.v@gmail.com*

Представлена модель расчета электромагнитного отклика системы из двух электрически связанных углеродных нанотрубок (СУНТ). Рассчитаны спектры поляризуемости СУНТ при различных проводимостях контакта между трубками.

#### ВВЕДЕНИЕ

СУНТ представляет собой систему из двух УНТ, которые соприкасаются друг с другом в одном месте (контакте) и в общем случае ориентированы под произвольным углом друг относительно друга. СУНТ является элементарной ячейкой, в которой может наблюдаться влияние контакта между трубками на их электромагнитный отклик. Актуальность изучения СУНТ определяется тем, что из них могут быть составлены композитные материалы и электрические цепи, в которых углеродные нанотрубки (УНТ) электрически связаны между собой.

Нахождение электромагнитного отклика СУНТ производится через постановку и решение краевой электродинамической задачи с использованием метода интегральных уравнений [1]. Поверхностная проводимость УНТ находится на основе полуклассических и квантово-механических рассмотрений [1]. Проводимость контакта между УНТ вводится на основе рассмотрения Ландауэра [2]. В данном рассмотрении проводимость контакта определяется вероятностью прохождения электронов через контакт. Контактная разность потенциалов, между трубками, находится через рассеянные трубками поля. Токи, текущие по трубкам и ток, текущий через контакт между трубками, связаны через условия неразрывности. Ранее задача нахождения элек-