

4. Highly tunable exchange in donor qubits in silicon / Y.E. Wang [et al.] // Quantum Information. – 2016. – Vol. 2. – P. 16008.
5. Melnikov, D.V. Single-particle state mixing in two-electron double quantum dots / D.V. Melnikov, J.P. Leburton // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 73. – P. 155301.
6. Exchange coupling in silicon quantum dots: Theoretical considerations for quantum computation / Q. Li [et al.] // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81, № 8. – P. 085313.
7. Baruffa, F. Spin-orbit coupling and anisotropic exchange in two-electron double quantum dots / F. Baruffa, P. Stano, J. Fabian // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 82, № 4. – P. 045311.
8. Kwasniowski, A. Exchange interaction tuned by electric field in quantum dots / A. Kwasniowski, J. Adamowski // Phys. Status Solidi C. – 2009. – Vol. 6, № 4. – P. 821–824.
9. Nowak, M.P. Manipulation of two-electron states by the electric field in stacked self-assembled dots / M.P. Nowak, B. Szafran, F.M. Peeters // J. Phys.: Condens. Matter. – 2008. – Vol. 20. – P. 395225.
10. Burkard, G. Spin interactions and switching in vertically tunnel-coupled quantum dots / G. Burkard, G. Seelig, D. Loss // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 62, № 4. – P. 2581.
11. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G.D.J. Smit [et al.] // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – P. 193302.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

Е. А. Левчук

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,
e-mail: liauchuk.alena@gmail.com*

Проведено численное моделирование электронной структуры квантовой точки, индуцированной электрическим полем дискообразного затвора и находящейся во внешнем магнитном поле. На основании модели анизотропного гармонического осциллятора предложена классификация электронных состояний электрически индуцированной квантовой точки и описана их эволюция при изменении величины магнитного поля. Изучены условия возникновения групп близких уровней энергий (электронных оболочек) при изменении потенциала затвора.

Ключевые слова: электрически индуцированная квантовая точка; энергетический спектр; гармонический осциллятор; численное моделирование; квазипересечение.

EFFECT OF MAGNETIC FIELD ON ELECTRONIC STRUCTURE OF NEAR-SURFACE ELECTRICALLY INDUCED QUANTUM DOT

E. A. Levchuk

*Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus
Corresponding author: E. A. Levchuk (liauchuk.alena@gmail.com)*

Numerical modeling of excited states in a quantum dot, induced by electrical field of disc-shaped gate, is carried out in the presence of magnetic field. On the basis of anisotropic harmonic oscillator model, classification for electronic states of electrically induced quantum dot is given and its evolution in gate potential and magnetic field is described.

The conditions of emergence of close energy levels (electronic shells) are studied for different gate potentials.

Key words: electrically induced quantum dot; energy spectrum; harmonic oscillator; numerical modeling; anticrossing.

ВВЕДЕНИЕ

Квантовые точки (КТ) могут использоваться в качестве элемента многих устройств, таких как фотодетекторы, лазеры, солнечные элементы [1], наноэлектронные приборы [2]. Массивы КТ предлагаются в качестве одной из возможных систем для реализации квантового компьютера [3]. Целенаправленное использование КТ в различных устройствах предполагает знание их электронной структуры.

При изучении энергетического спектра КТ часто используют упрощенные модели, для которых возможно получить аналитические выражения, описывающие волновые функции и соответствующие значения энергии. Примерами таких моделей являются, в первую очередь, КТ с гармоническим [1,4,5] и кусочно-постоянным [6] ограничивающим потенциалом.

Во многих приложениях предполагается использование электрически индуцированных КТ (ЭИКТ), в которых потенциал локализации электрона создается с помощью наноразмерного затвора [7–8]. Для подобных систем аналитическое решение не может быть получено, поэтому при расчете электронных состояний в таких системах следует применять численные методы. Однако при использовании численных методов возникают трудности с качественным описанием энергетической структуры ЭИКТ и предсказанием закономерностей ее изменения при приложении внешних полей.

В данной работе рассматривается применимость модели трехмерного анизотропного гармонического осциллятора для описания влияния магнитного поля на электронную структуру ЭИКТ, ограничивающий потенциал которой создается электрическим полем затвора в виде тонкого диска [9].

Будем рассматривать электронные состояния в двух видах КТ. Первый вид – это КТ, потенциал локализации которой является анизотропным параболическим, а второй вид – электрически индуцированная КТ. Обе точки будем считать расположенными вблизи поверхности полупроводника с диэлектрической проницаемостью ϵ_s и эффективной массой электрона m^* в области $z > 0$. В плоскости $z = 0$ находится слой диэлектрика, создающий бесконечно высокий потенциальный барьер и обеспечивающий равенство нулю волновой функции на плоскости XOY . Однородное магнитное поле B направлено вдоль оси OZ . В рамках приближения эффективной массы исследуемая система описывается стационарным уравнением Шредингера для огибающей функции Ψ и энергии E :

$$\left(-\nabla^2 - i\mu \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \hat{V} \right) \Psi = E\Psi, \quad z > 0 \quad (1)$$

$$\Psi|_{z=0} = 0; \Psi \rightarrow 0 \text{ при } \rho \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty \quad (2)$$

где (ρ, z, φ) – цилиндрические координаты, а в качестве параметров обезразмеривания используется эффективный боровский радиус $a^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_s\hbar^2/m^*e^2$ для длины и эффективный Ридберг $Ry^* = m^*e^4/2\hbar^2\epsilon_s^2$ для энергий. В уравнении (1) μ – обезразме-

ренное значение магнитного поля, определяемое выражением $\mu = (a^*)^2 / \lambda_B^2$, где магнитная длина определяется как $\lambda_B = (\hbar / Be)^{1/2}$. Оператор \hat{V} представляет собой потенциал локализации.

Квантовую точку, описываемую анизотропным параболическим потенциалом, будем называть приповерхностной параболической КТ. Будем рассматривать анизотропный потенциал локализации вида $\hat{V} = k_\rho^2 \rho^2 / 4 + k_z^2 z^2 / 4$, где $k_\rho = \hbar \omega_\rho / R y^*$, $k_z = \hbar \omega_z / R y^*$, ω_ρ , ω_z – частоты соответствующих гармонических колебаний. Для такого потенциала значения энергии определяются выражением:

$$E = K(2n_\rho + |m| + 1) + k_z(n_z + 1/2) + m\mu \quad (3)$$

$$K = \sqrt{k_\rho^2 + \mu^2}, \quad n_\rho = 0, 1, 2, \dots; \quad n_z = 1, 3, 5, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Как видно из формулы (3) уровни энергии определяются тройкой квантовых чисел (n_ρ, n_z, m) , и в дальнейшем мы будем использовать их для обозначения состояний цилиндрически симметричной КТ. Также будем нумеровать состояния такой КТ в порядке возрастания энергии отдельно для случаев $m = 0$ (σ -состояния), $|m| = 1$ (π -состояния). Состояния с $|m| = 2$ и $|m| = 3$ будут обозначаться δ и γ , соответственно.

Волновая функция параболической КТ может быть охарактеризована числом экстремумов: электронная плотность на плоскости $\varphi = const$ имеет $(n_\rho + 1)(n_z + 1)/2$ локальных экстремумов: по $X_\rho = n_\rho + 1$ экстремумов в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по $X_z = (n_z + 1)/2$ экстремумов в рядах, параллельных оси OZ .

В качестве характеристики, определяющей форму рассматриваемой КТ, можно использовать параметр анизотропии:

$$\gamma_\mu = k_z / K = k_z / \sqrt{k_\rho^2 + \mu^2}. \quad (4)$$

В частном случае $\gamma_\mu = 1$ получаем изотропную приповерхностную параболическую КТ, энергии которой определяются выражением:

$$E = k(2n_r + l + 3/2) + m\mu, \quad (5)$$

где $k^2 = \mu^2 + k_\rho^2 + k_z^2$, $n_r = 0, 1, 2, \dots$, $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$. При этом для удовлетворения граничного условия (2) необходимо, чтобы разность $l - |m|$ была нечетной. Из (5) следует, что уровни энергии в изотропной КТ являются вырожденными при одинаковых $n = 2n_r + l$ и m , кратность вырождения составляет $n/2$ уровней для четных n и $(n+1)/2$ – для нечетных. При нулевом магнитном поле состояния являются вырожденными при одинаковых n , независимо от m , кратность вырождения равна $(n+1)(n+2)/2$.

В случае ЭИКТ будем предполагать, что потенциал локализации создается в результате приложения внешнего потенциала Φ_0 к дискообразному затвору, находящемуся на поверхности полупроводника. В этом случае задача (1)–(2) решалась численно с помощью метода конечных элементов. Результаты расчетов представлены на рис. 1.

Из рис. 1, а видно, что состояния с близкими энергиями можно объединить в электронные оболочки. Расчеты, выполненные при других значениях потенциала

затвора, показывают, что объединение некоторых состояний в оболочку может как не зависеть от потенциала на затворе (например, пары состояний $\sigma 2-\delta 1$ и $\sigma 4-\delta 2$), так и происходить лишь при определенных значениях Φ_0 (как например, состояние $\pi 3$ на рис. 1, *a*).

Расположение экстремумов волновых функций ЭИКТ подобно расположению экстремумов волновых функций анизотропной параболической КТ: по X_p экстремумов в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по X_z экстремумов в рядах, параллельных оси OZ . Поэтому, помимо нумерации состояний в порядке возрастания в пределах одинаковых m , можно обозначать состояния тройкой чисел (n_p, n_z, m) , где $n_p = X_p - 1$, $n_z = 2X_z - 1$ (рис. 1, *a*).

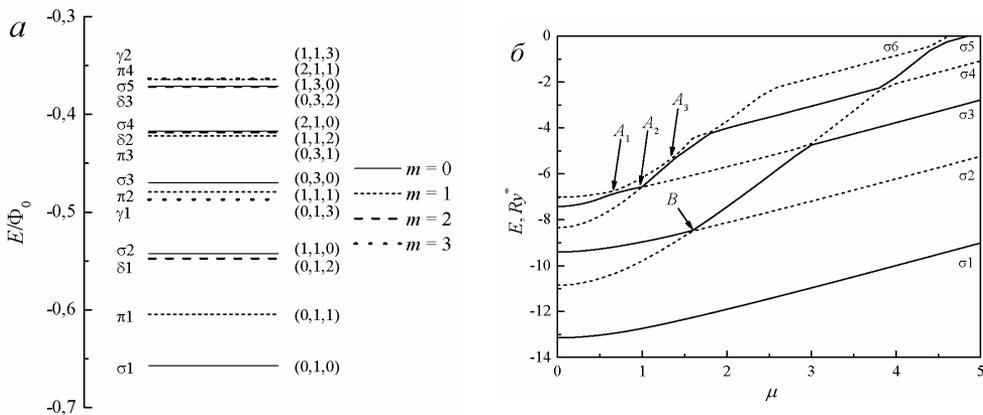


Рисунок 1. – Энергии основного и низших возбужденных состояний электрически индуцированной квантовой точки; $\Phi_0 = 20Ry^*/e$, $d = 6a^*$; *a* – уровни энергии при нулевом магнитном поле, нормированные на величину потенциала затвора; *б* – зависимости энергий от величины магнитного поля

Модель анизотропной приповерхностной параболической КТ позволяет предсказать вырождение состояний ЭИКТ с одинаковыми $n = 2n_p + |m|$ и n_z . Как видно из рис. 1, *a*, уровни соответствующих состояний ЭИКТ близки друг к другу, т.е. уровни состояний $\sigma 2-\delta 1$, $\pi 2-\gamma 1$, $\sigma 4-\delta 2$, $\pi 4-\gamma 2$, $\sigma 5-\delta 3$ можно рассматривать как квазивырожденные. Такое квазивырождение будет иметь место при любых потенциалах на затворе.

Вырождение уровней параболической КТ также может возникать при определенных значениях параметра анизотропии. Для двух состояний с квантовыми числами $(n_p^{(1)}, n_z^{(1)}, m^{(1)})$ и $(n_p^{(2)}, n_z^{(2)}, m^{(2)})$ такие значения определяются выражением:

$$\gamma_0 = -\frac{2(n_p^{(1)} - n_p^{(2)}) + |m^{(2)}| - |m^{(1)}|}{n_z^{(1)} - n_z^{(2)}} \quad (6)$$

Например, при $\gamma_0 = 1.5$ условию (6) удовлетворяют состояния $(1, 3, 0)$, $(2, 1, 1)$, $(0, 3, 2)$ и $(1, 1, 3)$. Для ЭИКТ им соответствуют состояния $\sigma 5$, $\pi 4$, $\delta 3$, $\gamma 2$. Их близость

друг к другу (рис. 1, *a*) свидетельствует о том, что этим состояниям ЭИКТ можно приписать эффективный параметр анизотропии ($\gamma_{\text{eff}}^{(m)}$), близкий к 1.5.

С ростом потенциала на затворе значение $\gamma_{\text{eff}}^{(m)}$ увеличивается. В результате, для ЭИКТ с изменением величины потенциала на затворе возможно квазипересечение (отталкивание) электронных уровней. Например, расчеты показали, что для $d = 6a^*$ при $\Phi_0 \approx 35Ry^*/e$ находится точка отталкивания уровней $\sigma 6$ - и $\sigma 7$ -состояний. В точках отталкивания происходит изменение пространственного расположения экстремумов волновых функций ЭИКТ.

Квазипересечение электронных уровней также имеет место и при увеличении магнитного поля (точки A_1, A_2, A_3, B на рис. 1, *б*). Аналогичное отталкивание было обнаружено с помощью численных расчетов для донорных состояний [10], однако в случае ЭИКТ квазипересечение происходит при относительно малых магнитных полях.

Как и в случае квазипересечения уровней с изменением потенциала на затворе, модель параболической КТ позволяет предсказать отталкивание электронных уровней при увеличении магнитного поля. Так, положение точек пересечения уровней параболической КТ для состояний, изображенных на рис. 1, *б*, можно определить из соотношения:

$$\mu^2 = \left(k_z \frac{n_z^{(1)} - n_z^{(2)}}{2(n_p^{(1)} - n_p^{(2)})} \right)^2 - k_p^2. \quad (7)$$

При $\gamma_\mu = 1$ происходят пересечения уровней параболической КТ, вызванные вырождением анизотропной параболической КТ в изотропную. Этим пересечениям соответствуют точки отталкивания ЭИКТ, обозначенные A_1, A_2, A_3 (для $\sigma 4$ -, $\sigma 5$ -, $\sigma 6$ -состояний) и B (для $\sigma 2$ -, $\sigma 3$ -состояний) на рис. 1*б*. При этом для состояний с более высоким значением энергии уменьшается величина $\gamma_{\text{eff}}^{(m)}$, поэтому отталкивание, соответствующее $\gamma_\mu = 1$, происходит при различных значениях μ . В результате этого трем точкам квазипересечения уровней ЭИКТ A_1, A_2, A_3 на рис. 1, *б* соответствует одна точка пересечения уровней параболической КТ.

Использование модели анизотропной параболической КТ имеет некоторые ограничения. Так, при малых Φ_0 основная часть области локализации волновых функций высоковозбужденных состояний находится в области $r \gg d$, где потенциал можно приближенно полагать равным $\hat{V} \approx 2\Phi_0/\pi r$, поэтому потенциал ЭИКТ плохо аппроксимируется анизотропным параболическим потенциалом.

Таким образом, в работе проведено численное моделирование возбужденных состояний квантовой точки, индуцированной электрическим полем дискообразного затвора. На основе модели анизотропной приповерхностной параболической квантовой точки, предложена классификация состояний электрически индуцированной квантовой точки, а также описано качественное влияние величины магнитного поля на энергетический спектр электрона. Показано, что использование модели приповерхностной параболической квантовой точки позволяет предсказать точки квазипересечения уровней электрически индуцированной квантовой точки.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells / J. Wu [et al.] // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – V. 48. – P. 363001.
2. Silicon quantum electronics / F.A. Zwanenburg [et al.] // Rev. Mod. Phys. – 2013. – V. 85, № 3. – P. 961.
3. Loss, D. Quantum computation with quantum dots / D. Loss, D.P. DiVincenzo // Phys. Rev. A. – 1998. – V. 57, № 1. – P. 120-126.
4. Ciftya, O. Understanding electronic systems in semiconductor quantum dots / O. Ciftya // Physica Scripta. – 2013. – Vol. 88. – P. 058302.
5. Fujito, M. Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots / M. Fujito, A. Natori, H. Yasunaga // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 53, № 15. – P. 9952-9958.
6. Willatzen, M. Separable boundary-value problems in physics / M. Willatzen, L.C.L.Y. Voon. – Wiley-VCH, 2011. – 377 p.
7. Kane, B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B.E. Kane // Nature (London). – 1998. – V. 393. – P. 133-137.
8. Single-atom transistor / M. Feuchtle [et al.] // Nature nanotechnology. – 2012. – V. 7, № 4. – P. 242-246.
9. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G.D.J. Smit [et al.] // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 68. – P. 193302.
10. Zimmerman, M.L. Evidence of an approximate symmetry for hydrogen in a uniform magnetic field / M.L. Zimmerman, M.M. Kash, D. Kleppner // Phys. Rev. Lett. – 1980. – V. 45, № 13. – P. 1092-1094.

ВЛИЯНИЕ БУФЕРНОГО СЛОЯ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ НА РОСТ КАРБИДА КРЕМНИЯ НА КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКЕ

**М. В. Лобанок¹, С. Л. Прокопьев¹, А. Г. Новиков¹,
О. В. Мильчанин¹, А. Л. Долгий², В. П. Бондаренко², П. И. Гайдук¹**

¹⁾ *Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,*

²⁾ *Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. Петруся Бровки 6, 220013 Минск, Беларусь,
e-mail: mishalobanok@gmail.com*

Методами резерфордовского обратного рассеяния, растровой электронной микроскопии и просвечивающей электронной микроскопии исследованы слои SiC на Si с буферными слоями пористого кремния, выращенные при высокотемпературном отжиге в вакууме. Методами электронной микроскопии и электронной дифракции обнаружено формирование слоев кубического карбида кремния в виде двухфазной системы – моно- и поликристаллической фазы. Показано, что в результате высокотемпературной обработки происходит образование зерен SiC в порах, а также происходит частичное зарастание пор. Показано, что изменение размера пор изначального пористого слоя приводит к изменению размеров зерен на поверхности и времени зарастания пор.

Ключевые слова: карбид кремния; буферный слой; пористый кремний.