

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК МОДЕЛИ КУБИТА В КРЕМНИИ

Е.А. ЛЕВЧУК, Л.Ф. МАКАРЕНКО

The application of the finite element method for simulation the effect of electric field on shallow donor states near the surface of the semiconductor is considered. The influence of geometrical parameters on the ionization potential of the donor is studied. Peculiarities of donor states for different gate configurations are investigated

Ключевые слова: кубит, донор, волновая функция, стационарное уравнение Шредингера, энергетический уровень

В настоящее время одними из наиболее перспективных физических объектов для реализации квантовых вычислений и квантовых средств связи являются одиночные атомы мелких примесей, размещенные вблизи поверхности полупроводника. Примерами таких объектов являются модели кубитов на основе примесных атомов фосфора в кремнии [1; 2].

Для моделирования характеристик подобных устройств рассматривалась следующая система. Область  $z > 0$  полагалась заполненной полупроводником, в плоскости  $z = 0$  находился тонкий затвор в виде диска диаметра  $d$ , заряженный до потенциала  $\Phi_0$ , центр которого находился в начале координат. На оси затвора на расстоянии  $z_0$  от него расположен донор. Рассматривались также состояния электрона в однородном внешнем электрическом поле, что соответствует затвору бесконечных размеров.

Электронные состояния рассматривались в приближении эффективной массы, что приводит к краевой задаче для стационарного уравнения Шредингера в полупространстве. Для решения этой задачи использовался метод конечных элементов с треугольными линейными элементами. При этом неограниченная область, в которой определена задача, заменялась конечной областью.

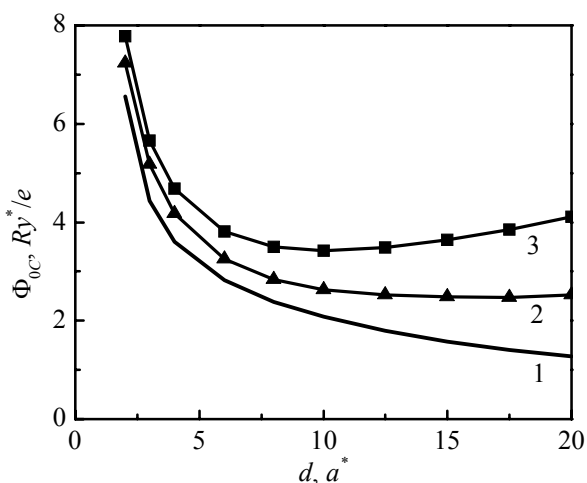


Рис. 1 — Зависимость критического потенциала от диаметра затвора: кривая 1 определена из уравнения  $E_0^g(\Phi_0) = -Ry^*$ , кривые 2 и 3 — как минимум разности энергий основного и первого возбужденного состояний для  $z_0 = 16$  и  $z_0 = 8$  соответственно

Основной качественной характеристикой рассматриваемой системы является критический потенциал ( $\Phi_{0c}$ ) — потенциал на затворе, при котором происходит переход максимума квадрата волновой функции электрона от донора к затвору. При достаточно больших  $z_0$  критический потенциал может быть оценен точкой, в которой  $E_0^g(\Phi_0) = -Ry^*$ , где  $E_0^g(\Phi_0)$  — зависимость энергии основного состояния электрона в поле затвора (кривая 1 на рисунке 1). Для конечных  $z_0$  критический потенциал можно определить как точку минимума разности между энергиями первого возбужденного и основного состояний (кривые 2 и 3 на рисунке 1).

Сравнение случаев затворов конечных и бесконечных размеров показало, что для однородного внешнего поля расстояние между точками квазипересечения электронных термов существенно меньше, чем в случае затвора конечных

размеров, что приводит к ограниченности применения вариационного метода в случае однородного внешнего поля.

### Литература

1. Kane, B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer // Nature (London). 1998. V. 393. P. 133-137.
2. Hollenberg [et al.]. Charge-based quantum computing using single donors in semiconductors // Physical Review B. 2004. V. 69. P. 113301.

## ИЗУЧЕНИЕ Cu/Al и Pd/Fe СТРУКТУР, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО АТОМНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

Д.И. ЛИТВИНОВ, В.В. ТУЛЬЕВ

Rutherford backscattering and RUMP simulation programmer have been applied to investigate composition of Cu/Al and Pd/Fe systems. They were prepared using dynamic atomic deposition process, when deposition of thin Cu (Pd) film on Al (Fe) substrate was assisted with irradiation  $Ar^+$  ions. The thickness of Cu film was  $\sim(10-15)$  nm, of Pd film -  $\sim(14-23)$  nm.

It was found, that the thickness of coating depends on parameter  $I/A$  (ratio the number  $I$  of assisting ions to the number  $A$  of atoms deposited coating)

Ключевые слова: динамическое атомное перемешивание, резерфордовское обратное рассеяние ионов гелия, распыление, радиационно-стимулированная диффузия, железо, алюминий, медь, палладий

Разработка новых методов модифицирования свойств поверхности материалов и изделий является одной из актуальных задач современной науки и техники. Модификация приповерхностных слоев материалов и изделий пучками заряженных частиц и потоками плазмы активно исследуется в последние десятилетия. При этом расширяется область использования ионно-лучевых и ионно-плазменных методов, как в научных, так и практических целях. Одним из методов ионно-лучевого модифицирования поверхности материалов является метод динамического атомного перемешивания. Суть этого метода состоит в том, что процесс осаждения покрытий на подложку сопровождается облучением ионами инертных газов (ионным ассистированием). Применение этого метода обеспечивает хорошее сцепление осаждаемого покрытия с подложкой, при этом состав наносимых слоев и толщина не ограничиваются.

В качестве подложек использовались алюминий чистотой 99,995% и железо чистотой 99,95%, на которые наносились соответственно Cu- и Pd-покрытия методом динамического атомного перемешивания. В качестве ассистирующих ионов использовались ионы аргона с энергией 6 кэВ и интегральными потоками  $(0,7-1,6) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ . Плотность  $j$  тока в центре ионного пучка составляла  $20,2 \pm 0,2 \text{ мкА/см}^2$ . Элементный состав, распределение компонентов покрытия по глубине и толщина покрытия определялись методом резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием.

Установлено, что при осаждении Cu-покрытия на алюминий формируются Cu/Al-структуры толщиной ~60 нм, которые содержат ~10 ат.% меди, ~1 ат.% кислорода и ~0,3 ат.% аргона. При этом наблюдается проникновение атомов алюминия в пленку вследствие атомного перемешивания, проникновение атомов меди и кислорода в алюминий вследствие радиационно-стимулированной диффузии, а также распыление пленки меди. Отличительной особенностью при перемешивании Cu/Al структур является наличие кислорода в приповерхностных слоях, источником которого служит оксидный слой, образующийся на поверхности алюминиевой матрицы. При осаждении Pd-покрытия на железо формируются Pd/Fe-структуры толщиной ~40 нм, которые содержат ~(30-47) ат.% палладия, ~(53-68) ат.% железа и ~(0,5-1,2) ат.% аргона. При формировании Pd/Fe-структуры наблюдается проникновение атомов железа в пленку палладия вследствие атомного перемешивания, проникновение атомов палладия в железо вследствие радиационно-стимулированной диффузии, а также распыление формируемой структуры.

Предложен способ определения толщины покрытия, сформированного методом динамического атомного перемешивания. Установлено что толщина сформированного Pd-покрытия зависит от параметра  $I/A$  (отношение плотности потока  $I$  ассистирующих ионов к плотности потока  $A$  атомов осаждаемого покрытия). Следует также отметить, что при расчете толщины формирующегося покрытия необходимо учитывать не только процессы распыления атомов осаждаемой пленки, но и процессы распыления атомов подложки.

©ВГУ имени П.М. Машерова

## ЛОКАЛЬНО НОРМАЛЬНЫЕ КЛАССЫ ФИТТИНГА КОНЕЧНЫХ ГРУПП

А.В. МАРЦИНКЕВИЧ, Н.Т. ВОРОБЬЁВ

In this paper we describe a characterization of products of Fitting classes and lattice of  $\pi$ -normal Fitting classes

Ключевые слова: класс Фиттинга,  $\mathfrak{X}$ -нормальный класс Фиттинга

Все рассматриваемые группы в настоящей работе конечны и разрешимы.

Основополагающей для исследований нормальных классов Фиттинга является работа Блессеноля-Гашюца [1], в которой построен ряд нетривиальных примеров нормальных классов Фиттинга. Напомним, что класс Фиттинга  $\mathfrak{F}$  называют нормальным [1] в классе  $\mathfrak{S}$  всех конечных разрешимых групп или  $\mathfrak{S}$ -нормальным, если для любой группы  $G \in \mathfrak{S}$  её  $\mathfrak{F}$ -радикал является  $\mathfrak{F}$ -максимальной подгруппой группы  $G$ .

Естественным обобщением  $\mathfrak{S}$ -нормальных классов Фиттинга является понятие  $\mathfrak{X}$ -нормального класса Фиттинга, где  $\mathfrak{X}$  - некоторый класс Фиттинга. Класс Фиттинга  $\mathfrak{F}$  является  $\mathfrak{X}$ -нормальным, или локально нормальным, если  $\mathfrak{F} \subseteq \mathfrak{X}$  и для любой группы  $G \in \mathfrak{X}$  её  $\mathfrak{F}$ -инъектор – нормальная подгруппа группы  $G$ .