

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании проведенных экспериментальных исследований можно заключить, что необходимыми условиями для проявления как газодинамического, так и плазмообразующего механизмов, приводящих к изменению скорости пробивки и плотности эрозионной плазмы, являются: во-первых, ограничения бокового разлета плазмы стенками формируемого канала и, во-вторых, увеличение вероятности низкочастотного оптического пробоя воздуха насыщенного микрочастицами металла вторым импульсом, следующим с небольшой задержкой после первого. С ростом задержки второго импульса следует ожидать снижение его роли в скорости образования продуктов-прекурсоров поскольку взаимодействие его с плазменно-пылевым облаком будет происходить уже за пределами канала. Изменяя количество лазерных импульсов в серии возможно целенаправленно менять состав прекурсоров для изготовления тех или иных нанокерамик. Нанопорошки преимущественно имеют размер 30–40 нм.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Khomskii D.I and Mizokawa T. Orbitally induced Peierls state in spinels. Phys. Rev. Lett. 2005. V.94 (15). 156402.
2. Masoud Salavati-Niasari, Fatemeh Davar, Masoud Farhadi. Synthesis and characterization of spinel-type CuAl_2O_4 nanocrystalline by modified sol–gel method. J. Sol-Gel Sci Technol. 2009. V.51. P.48–52.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТОПОЛЕВЫХ ЭФФЕКТОВ В ЭЛЕМЕНТАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ

Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко

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

Разработан численный алгоритм расчета энергий электронов во встроенных квантовых точках с кусочно-постоянным потенциалом под действием внешнего однородного магнитного поля. Представлены результаты моделирования электронной структуры одиночной квантовой точки и обменной энергии в системе двух квантовых точек. Установлены характеристические особенности изменения структуры волновых функций и энергетического спектра одиночной квантовой точки в магнитном поле. Изучено влияние расстояния между точками и величины магнитного поля на обменную энергию.

Ключевые слова: квантовая точка; энергетический спектр; численное моделирование; обменная энергия; магнитное поле.

NUMERICAL MODELING OF MAGNETIC FIELD EFFECTS IN ELEMENTS OF SEMICONDUCTOR QUANTUM COMPUTERS

E. A. Levchuk, L. F. Makarenko

Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus

Corresponding author: E.A. Levchuk (liauchuk.alena@gmail.com)

A numerical algorithm is developed for calculating the electron energies of embedded quantum dots with a piecewise constant potential in external uniform magnetic field. The calculation results for electronic structure of a single quantum dot and exchange energy in a system of two quantum dots are presented. Some characteristic features of the wave function structure and the energy spectrum of a single quantum dot in magnetic field are established. The effect of the distance between dots and the magnetic field magnitude on the exchange energy is investigated.

Key words: quantum dot; energy spectrum; numerical modeling; exchange energy; magnetic field.

ВВЕДЕНИЕ

Магнитное поле является одним из возможных способов управления электронными волновыми функциями в различных наноразмерных полупроводниковых устройствах на основе квантовых точек (КТ) [1,2]. Примерами таких устройств являются кубиты для квантовых компьютеров различной конфигурации [3,4]. Для многих подобных устройств необходимо управление взаимодействием электронов соседних квантовых точек, например, посредством влияния внешних полей. Как следствие, возникают задачи моделирования управления внешними полями обменной энергией (J) пары квантовых точек, а также исследования структуры волновых функций одиночной КТ для оценки перекрытия функций. Такие задачи, как правило, решаются для КТ с параболическим ограничивающим потенциалом [5], позволяющим проводить многие расчеты аналитически. Поэтому есть необходимость исследования систем с более реалистичным потенциалом и разработки численных методов для расчета состояний в таких системах.

Будем рассматривать электронные состояния встроенных квантовых точек с кусочно-постоянным потенциалом. 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 .

Рассмотрим вначале одиночную квантовую точку в магнитном поле. В рамках приближения эффективной массы для магнитного числа $m = 0$ эта система описывается стационарным уравнением Шредингера для огибающей функции Ψ и энергии E :

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

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

где (ρ, z, φ) – цилиндрические координаты, а в качестве параметров обезразмеривания используется эффективный борковский 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 – обезразмеренное значение магнитного поля, определяемое выражением $\mu = (a^*)^2/\lambda_B^2$, где магнитная длина $\lambda_B = (\hbar/Be)^{1/2}$. Оператор $\hat{V}_D$ представляет собой потенциал локализации, для встроенных КТ он имеет вид:

$$\hat{V}_D = \begin{cases} -V_0, & \rho^2 + (z - z_0)^2 \leq r_0^2 \\ 0, & \rho^2 + (z - z_0)^2 > r_0^2 \end{cases} \quad (3)$$

Задача (1)–(3) решалась с помощью метода конечных элементов с кусочно-линейными пробными функциями на треугольных элементах. Состояния с $m = 0$ обозначались символом σ ($\sigma 1$ – основное состояние, $\sigma 2$ – первое возбужденное состояние и т.д.).

Волновые функции возбужденных состояний можно охарактеризовать нодальными поверхностями – поверхностями, отделяющими локальные экстремумы волновых функций и на которых волновая функция обращается в нуль. Для связанных состояний сферически симметричной КТ такие нодальные поверхности представляют собой концентрические сферы и конусы (возможно, вырождающиеся в плоскость) с вершиной в центре КТ. При увеличении магнитного поля нодальные поверхности перестраиваются: сферы переходят в вытянутые сфероиды с большой полуосью, параллельной оси $\rho = 0$, а центры конусов смещаются вдоль оси $\rho = 0$ с одновременным увеличением телесного угла при вершине конуса. Такую перестройку нодальных поверхностей можно видеть для $\sigma 4$ - и $\sigma 5$ -состояний при $\mu = 1$ на рис. 1, б. При дальнейшем увеличении магнитного поля сфероидальные нодальные поверхности вырождаются в цилиндры с образующей, параллельной оси $\rho = 0$, а конические – в плоскости, параллельные плоскости $z = 0$ ($\mu = 2.5$ на рис. 1, б).

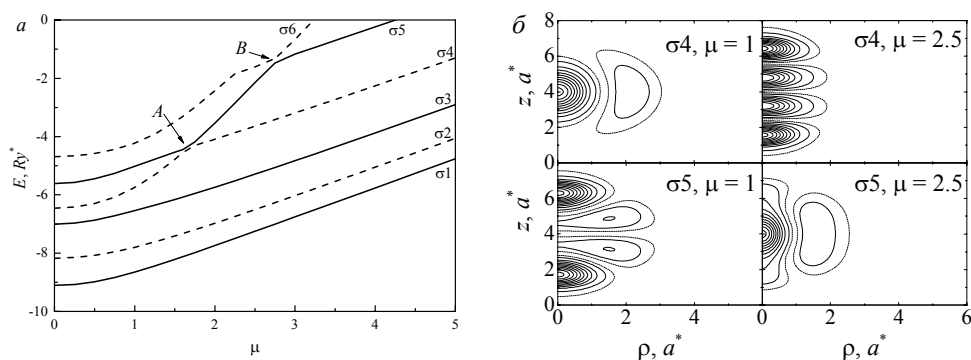


Рисунок 1. Энергии основного и низших возбужденных состояний встроенной квантовой точки с кусочно-постоянным потенциалом (а) и электронная плотность $\sigma 4$ - и $\sigma 5$ -состояний до точки квазипересечения А ($\mu = 1$) и после нее ($\mu = 2.5$) (б).

Параметры квантовой точки: $V_0 = 10Ry^*/e$, $r_0 = 3a^*$

Таким образом, при больших магнитных полях структура волновых функций становится схожей со структурой волновых функций точки, потенциал которой допускает разделение переменных по ρ и z .

При увеличении магнитного поля происходит не только перестройка нодальных поверхностей, но и изменение порядка следования состояний. При больших магнитных полях состояния с локальными экстремумами волновой функции, расположенными вдоль оси $\rho = 0$ (т.е. нодальными плоскостями, параллельными плоскости $z = 0$), имеют меньшую энергию. Вследствие этого, с ростом магнитного поля происходит перераспределение расположения экстремумов (рис. 1, б), в точке которого возникает квазипересечение (отталкивание) уровней (например, точки A , B на рис. 1, а). Расчеты показали, что глубина КТ V_0 мало влияет на расположение точек квазипересечения, но увеличение радиуса КТ r_0 приводит к смещению точек отталкивания в сторону больших полей с сохранением общего порядка квазипересечений.

Скорость роста энергии с увеличением магнитного поля зависит от области локализации волновых функций в плоскости, перпендикулярной оси $\rho = 0$. Наименьшую скорость роста имеют состояния с локальными экстремумами, расположенными вдоль оси $\rho = 0$ (σ_4 , $\mu = 2.5$ на рис. 1, б). При этом область локализации функций вдоль плоскости XOY для таких состояний практически одинаковая, поэтому одинаковой является и скорость возрастания энергий (например, состояния σ_1 , σ_2 , σ_3 , а также σ_5 до точки A и σ_4 после точки A на рис. 1, а). Одинаковая скорость роста энергий позволяет предсказать точки расположения квазипересечений, зная энергетический спектр и структуру состояний при нулевом магнитном поле.

Описанные выше особенности изменения электронной структуры одиночной квантовой точки позволяют понять поведение обменной энергии в магнитном поле в системе двух квантовых точек. Обменную энергию можно рассчитать как разность энергий триплетного и синглетного состояний, полученных при решении задачи:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (4)$$

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}^{(1)}(\vec{r}_1) + \hat{H}^{(1)}(\vec{r}_2) + \frac{2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (5)$$

$$\hat{H}^{(1)}(\vec{r}) = -\nabla^2 + \hat{V}_{D_1} + \hat{V}_{D_2} + \hat{V}_{\text{Magn}}, \quad (6)$$

где $\hat{V}_{D_i}$ – потенциалы квантовых точек, определяемые выражением (3). Влияние магнитного поля описывается оператором

$$\hat{V}_{\text{Magn}} = i\mu \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\mu^2}{4} (x^2 + y^2). \quad (7)$$

Для связанных состояний волновая функция стремится к нулю на бесконечности и на границе полупроводника при $z = 0$:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \xrightarrow{|\vec{r}_1| \rightarrow \infty} 0, \quad \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|_{z_1=0} = 0, \quad z_2 > 0, \quad (8)$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \xrightarrow{|\vec{r}_2| \rightarrow \infty} 0, \quad \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|_{z_2=0} = 0, \quad z_1 > 0. \quad (9)$$

Для решения задачи (4)–(9) использовался метод Хартри-Фока. Для вычисления обменных интегралов решалась задача для уравнения Пуассона, которая сводилась к соответствующей двумерной задаче с помощью преобразования Фурье, а затем решалась методом конечных элементов. При решении уравнения Шредингера исполь-

зовался вариационный метод с пробными функциями в виде линейной комбинации гауссиан с центрами на квантовых точках и между ними, на плоскости симметрии. При наличии магнитного поля имеет место сдвиг фазы для волновых функций, центрированных на разных точках [6]. Этот сдвиг фазы описывается множителем $\exp(\pm i\gamma R\mu/8)$, где R – расстояние между точками. Расчеты показывают, что наличие такого фазового сдвига существенно уменьшает обменную энергию и меняет характер зависимости от магнитного поля.

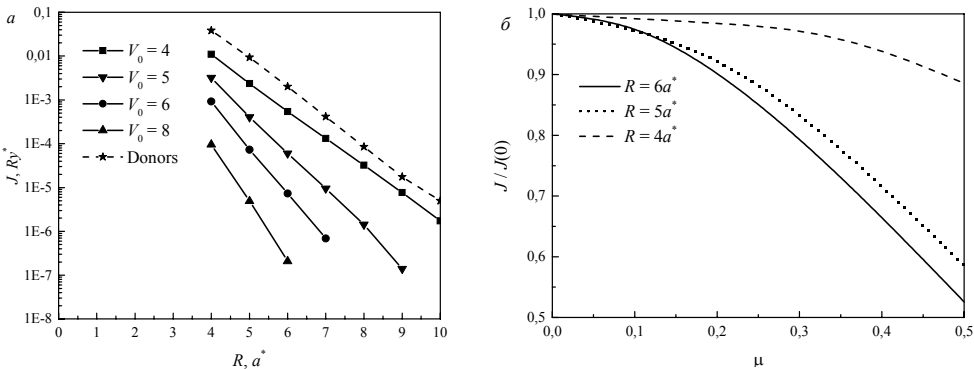
Величина обменной энергии зависит от перекрытия волновых функций электронов, находящихся на соседних квантовых точках [7]. Поэтому с увеличением расстояния между точками обменная энергия уменьшается (рис. 2а), причем уменьшение, как и в случае пары доноров [8] (звездочки на рис. 2а), происходит с экспоненциальной скоростью:

$$J \approx CR^{5/2} \exp(-2ER), \tag{10}$$

где E – энергия основного состояния изолированной квантовой точки, C – константа, зависящая от параметров точки.

Зависимость обменной энергии от магнитного поля представлена на рис. 2, б. Видно, что обменная энергия уменьшается с ростом напряженности магнитного поля.

Это уменьшение можно связать с тем, что происходит "сжатие" волновой функции в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля. При этом относительная скорость убывания J будет больше при больших значениях полей и расстояниях между точками.



**Рисунок 2. Обменная энергия в зависимости от расстояния между квантовыми точками (а) и от магнитного поля (б) для различных геометрических параметров;
 $a - r_0 = 1a^*$, $b - V_0 = 5Ry^*/e$, $r_0 = 1a^*$**

Сравнение рис. 2, а и 2, б показывает, что использование магнитного поля позволяет управлять обменной энергией более прецизионно, что может быть использовано для компенсации флуктуаций обменной энергии, связанных с флуктуациями расстояния между соседними квантовыми точками.

Таким образом, в работе описан численный алгоритм расчета энергетического спектра и обменной энергии встроенных квантовых точек под действием магнитного поля. Показано, что расположение точек квазипересечения электронных уровней одиночной квантовой точки может быть предсказано из анализа структуры волновых

функций в нулевом магнитном поле. Приведены результаты расчета обменной энергии двух квантовых точек в зависимости от расстояния между точками и магнитного поля. Установлено, что относительная скорость уменьшения обменной энергии под действием магнитного поля становится меньше при малых расстояниях между точками.

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. Kane, B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B.E. Kane // Nature (London). – 1998. – V. 393. – P. 133-137.
5. Exchange coupling in silicon quantum dots: Theoretical considerations for quantum computation / Q. Li [et al.] // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 81, № 8. – P. 085313.
6. Фейнман, Р. Фейнмановские лекции по физике: Квантовая механика (II) / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – Мир, 1967. – Т. 9. – С. 256.
7. Calderon, M.J. D. Magnetic-field-assisted manipulation and entanglement of Si spin qubits / M.J. Calderon, B. Koiller, S.D. Sarma // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 74, № 8. – P. 081302.
8. Fang, A. Effect of J-gate potential and uniform electric field on a coupled donor pair in Si for quantum computing / A. Fang, Y.C. Chang // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 155331.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ СВОЙСТВ ГРАФЕНА, МОДИФИЦИРОВАННОГО АТОМАМИ ВОДОРОДА

В. Н. Мищенко

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
П. Бровки 6, 220013 Минск, Беларусь, e-mail: mishchenko@bsuir.by*

Приведены результаты моделирования свойств графена, модифицированного атомами водорода. Графен рассматривается в настоящее время как один из наиболее перспективных материалов для создания новых полупроводниковых приборов для различных диапазонов частот. Использование графена и его различных модификаций с добавлением атомов – водорода, фтора и других химических элементов, позволяет разрабатывать полупроводниковые приборы и устройства с улучшенными выходными характеристиками. Путем моделирования из первых принципов получены основные характеристики материала графана, модификации графена с использованием атомов водорода, – зонная диаграмма, зависимости общей интенсивности рассеивания носителей заряда от величины энергии. Полученные зависимости и параметры графана могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои графена и других полупроводниковых материалов.

Ключевые слова: графен; графан; моделирование; зонная диаграмма.