

СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ НАНОРАЗМЕРНОГО ЗАТВОРА МОП - СТРУКТУРЫ

Л.Ф. Макаренко, Е.А. Левчук, О.А. Лаврова

БГУ, факультет прикладной математики и информатики,
БГУ, механико-математический факультет,
E-mail: makarenko@bsu.by

В настоящее время является актуальной задача управления волновыми функциями электрона в поле кулоновского центра, находящегося вблизи границы раздела двух сред. Такая задача для системы полупроводник/диэлектрик/металл решалась ранее в работах [1-4] на основе вариационного метода Ритца, что не позволяло оценить погрешности полученных значений энергий и качество пробных функций. В данной работе с использованием метода конечных элементов изучаются характеристики подобной системы с затвором в виде диска конечного размера. Изучаемая структура представляет особый интерес для разработки устройств квантовой информатики, поскольку является простейшей системой с конечным размером затвора.

Рассмотрим следующую задачу: пусть область $z > 0$ заполнена полупроводником, в плоскости $z = 0$ находится тонкий затвор в виде диска диаметра d , заряженный до потенциала ϕ_0 . Центр диска находится в начале координат. Между полупроводником и диском находится бесконечно тонкая прослойка диэлектрика,

которая не влияет на электростатический потенциал, но является барьером для электрона.

При решении задачи будем использовать два вида граничных условий для внешнего потенциала. В первом случае будем считать, что область $z < 0$ заполнена диэлектриком, а во втором случае будем задавать потенциал на границе полупроводника: на участке границы $z = 0, \rho > \frac{d}{2}$ потенциал электрического поля полагается равным нулю. Предполагалось также, что область $z < 0$ недоступна для электрона.

Для решения данной задачи использовался метод конечных элементов. При этом полупространство $(0, +\infty) \times (0, +\infty)$, в котором определена задача, заменялось конечной областью

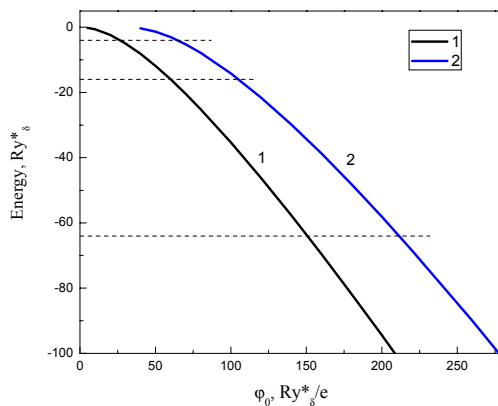


Рис. 1. Энергия основного состояния электрона в отсутствие донора без учета влияния изображения в единицах Ry_{δ}^* (см. пояснения в тексте). Кривая 1 соответствует случаю, когда область $z < 0$ заполнена диэлектриком, кривая 2 – случаю, когда потенциал электрического поля на границе вне диска полагается равным нулю

$(0, L_p) \times (0, L_z)$. Волновая функция аппроксимировалась с помощью линейных

функций на треугольной сетке. Для определения критического потенциала, при котором происходит переход электрона от донора к затвору, для разных диаметров затвора удобнее пользоваться единицами $Ry_{\delta}^* = Ry^* / \delta^2$, где δ есть отношение d к эффективному борновскому радиусу (a_B^*).

Результаты расчетов энергии основного состояния электрона в поле дискообразного затвора представлены на рисунке 1.

Значение критического потенциала (φ_{0C}) может быть оценено по точкам пересечения кривых $E_0(\varphi_0)$ с горизонтальной прямой, соответствующей энергии основного состояния донора E_0 (рис. 1). Величина E_0 равна эффективному Ридбергу ($-Ry^*$) [1].

Зависимость энергии от потенциала затвора с учетом потенциала изображения для случая с граничными условиями второго типа приведена на рисунке 2.

Для расчета связанных состояний во многих случаях наиболее простым оказывается использование метода Ритца с небольшим размером базиса, который позволяет существенно уменьшить вычислительные затраты и получить физически ясную трактовку результатов.

Мы предлагаем использовать пробную функцию вида:

$$\Psi_G(\rho, z) = C_1 e^{-\alpha_1 \rho^2} z e^{-\beta_1 z^2} + C_2 e^{-\alpha_2 \rho^2} z e^{-\beta_2 z^2}. \quad (1)$$

В качестве параметров $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$ использовались оптимальные значения, т.е. значения, дающие наименьшую энергию основного состояния. Значения параметров плавно изменяются в зависимости от φ_0 , и хорошо аппроксимируются полиномом второй степени. Использование таких пробных функций приводит к погрешности в энергии основного состояния менее 1 %.

Для расчета энергий основного и первого возбужденного состояний электрона в системе затвор\полупроводник с донором будем использовать пробную функцию вида:

$$\Psi_{\Sigma} = C_3 \Psi_G + C_4 z \Psi_D.$$

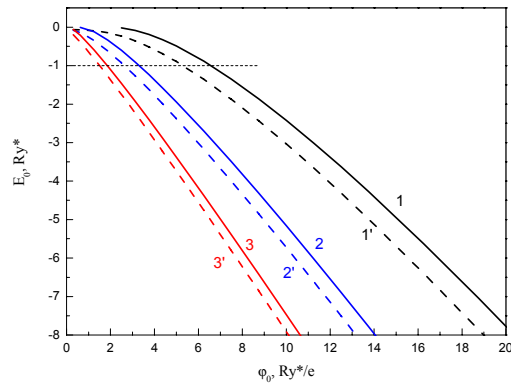


Рис. 2. Влияние потенциала изображения (V_{im})

на энергию основного состояния электрона вблизи дискообразного затвора для различных диаметров затвора. Сплошные линии соответствуют E_0 без учета V_{im} , а штриховые – с учетом

$$V_{im}. 1 - \text{диаметр затвора } d = 4a_B^*,$$

$$2 - d = 8a_B^*, 3 - d = 20a_B^*$$

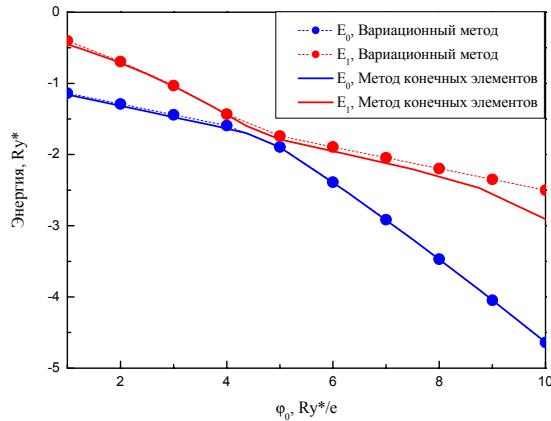


Рис. 3. Энергии основного (E_0) и первого возбужденного (E_1) состояний электрона в системе металлический затвор-донор при различных значениях потенциала на затворе, $d = 4a_B^*$, $z_0 = 8a_B^*$. Значение критического потенциала (ϕ_{0C}) соответствует минимальному расстоянию между кривыми

3. *Calderon, M.J.* Quantum control of donor electrons at the Si-SiO₂ interface / M.J. Calderon, Belita Koiller, Xuedong Hu, S. Das Sarma // Physical Review Letters. 2006. Vol. 96. 096802.
4. *Hao, Y.L.* Shallow donor states near a semiconductor-insulator-metal interface / Y.L. Hao, A.P. Djotyan, A.A. Avetisyan, F.M. Peeters // Physical Review B. 2009. Vol. 80. 035329.

Второе слагаемое представляет собой волновую функцию основного состояния донора. Зависимости энергий основного и первого возбужденного состояний от потенциала затвора, по которым можно определить ϕ_{0C} приведены на рисунке 3.

Данная зависимость может быть использована для оценки критического потенциала при расположении донора на расстоянии $\geq 4a^*$.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Smit, G.D.J.* Gate-induced ionization of single dopant atoms / G.D.J. Smit, S. Rogge, J. Caro, T.M. Klapwijk // Phys.Rev. B. 2003. Vol. 68. 193302.
2. *Kettle, L.M.* Numerical study of hydrogenic effective mass theory for an impurity P donor in Si in the presence of an electric field and interfaces / L.M. Kettle [et al.] // Phys.Rev. B. 2003. Vol.68. 075317.