

## ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ УПРАВЛЯЮЩИХ ЭЛЕКТРОДОВ НА ФУНКЦИОНИРОВАНИЕ ДОНОРНОГО КУБИТА

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

Белорусский государственный университет, факультет прикладной математики и информатики, 220030 Беларусь, г. Минск, пр. Независимости, 4, e-mail: [liauchuk@bsu.by](mailto:liauchuk@bsu.by)

Уменьшение размеров полупроводниковых приборов обусловило возрастание влияния на характеристики не только концентрации легирующих примесей, но и их расположения в рабочей области прибора [1]. Развитие методов контролируемого расположения атомов легирующих примесей позволило создавать приборы, в которых рабочим элементом являются один или несколько примесных атомов [2]. При этом управление характеристиками приборов основано не на изменении концентрации электронов, а на изменении локализации волновой функции отдельного электрона (передислокации волновой функции). В частности, этот принцип положен в основу функционирования одного из вариантов квантового компьютера [3].

Ранее были проведены теоретические исследования влияния внешнего электрического поля на локализацию донорного электрона, однако рассматривался только случай однородного поля [4] либо затвора в виде диска [5]. Очевидно, что эти случаи не отражают геометрии реальных приборов.

В данной работе рассматривается мелкий донор, находящийся в области  $z > 0$ , заполненной полупроводником с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_s$ . Внешнее электрическое поле создается затвором, расположенным в плоскости  $z = 0$ . Между затвором и полупроводником имеется бесконечно тонкая прослойка диэлектрика, не влияющая на распределение электрического потенциала. Будем рассматривать четыре типа распределения электрического поля. В первом случае (случай  $A_1$ ) затвор представляет собой тонкий круглый диск диаметра  $d$ , помещенный на границе двух диэлектрических сред. Во втором случае (случай  $A_2$ ) электрическое поле создается круглым диском диаметра  $d$ , окруженным заземленным экраном. В третьем случае (случай  $B$ ) на донор действует поле, созданное тонкой бесконечно длинной полосой ширины  $d$ . Также в работе рассматривается однородное внешнее электрическое поле (случай  $C$ ), что можно считать предельным случаем затворов в виде диска и полосы при  $d \rightarrow \infty$ . Во всех четырех случаях центр затвора находится в начале координат. Донор расположен на расстоянии  $z_0$  от затвора на оси  $Oz$ .

В рамках приближения эффективной массы, уравнение Шредингера для волновой функции  $\psi$  и энергии  $E$  электрона в обезразмеренной форме запишется в виде:

$$\left( -\nabla^2 + \hat{V}_G^{(i)} - \frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_0)^2}} \right) \psi = E\psi, \quad z > 0, \quad i = \{A_1, A_2, B, C\}, \quad (1)$$

где  $\hat{V}_G^{(i)}$  – потенциал внешнего электрического поля, созданного затвором. Уравнение (1) дополняется граничными условиями:

$$\psi|_{z=0} = 0; \quad \psi \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad |\vec{r}| \rightarrow \infty. \quad (2)$$

Задача (1) – (2) приведена с использованием эффективного боровского радиуса ( $a^*$ ) в качестве единицы длины и эффективного Ридберга ( $Ry^*$ ) – в качестве единицы энергии.

Выражения для  $\hat{V}_G^{(i)}$  в случаях  $A_1$  и  $A_2$  приведены в [5]. В случае  $B$ , когда внешнее поле создается полосой бесконечной длины, оператор потенциальной энергии принимает вид [6]:

$$\hat{V}_G^{(B)} = -\Delta\Phi \left( \frac{1}{\operatorname{arsinh}(2z_0/d)} \ln \left| \frac{y+iz}{d/2} + \sqrt{\left( \frac{y+iz}{d/2} \right)^2 - 1} \right| - 1 \right), \quad (3)$$

где  $\Delta\Phi = \Phi_0 - \Phi(0,0,z_0)$  – разность потенциалов между затвором ( $\Phi_0$ ) и точкой расположения донора ( $\Phi(0,0,z_0)$ ). Для однородного электрического поля:

$$\hat{V}_G^{(C)} = \Delta\Phi (z - z_0)/z_0. \quad (4)$$

В случаях  $A_1$  и  $A_2$  нулевой уровень потенциала находится на бесконечности, в случаях  $B$  и  $C$  – в точке расположения донора. Чтобы иметь возможность сравнивать результаты моделирования, в случаях  $A_1$  и  $A_2$  также будем использовать величину  $\Delta\Phi$  в качестве управляющего параметра и нулевой уровень потенциала выбирать в точке расположения донора. В качестве основной характеристики устройства будем рассматривать критическую разность потенциалов  $\Delta\Phi_C$ , при которой происходит переход максимума модуля электронной волновой функции основного состояния от донора к затвору.

Задача (1) – (2) решалась с помощью метода конечных элементов, а также стандартного вариационного метода с нелинейными вариационными параметрами. В случаях  $A_1$ ,  $A_2$  и  $C$  потенциал обладает осевой симметрией, что позволяет свести трехмерную задачу к двумерной. Метод конечных элементов для двумерной задачи был реализован в системе MATLAB с помощью линейных треугольных элементов. В случае  $B$ , который не сводится к двумерной задаче, для вычислений с помощью метода конечных элементов использовались пакеты GETDP и GMSH [7].

С помощью метода конечных элементов были получены зависимости критической разности потенциалов от расстояния между донором и затвором. Значение  $z_0$  практически не влияет на величину  $\Delta\Phi_C$  в случаях  $A_1$  и  $A_2$  (при изменении  $z_0$  от  $8a^*$  до  $16a^*$  значение  $\Delta\Phi_C$  изменяется не более чем на 2%) и оказывает несколько большее влияние в случаях  $B$  и  $C$  (для однородного поля изменение  $\Delta\Phi_C$  достигает 20 %).

Зависимость критической разности потенциалов от диаметра затвора (рисунок 1) для случаев  $A_1$  и  $A_2$  можно представить в виде степенной функции:

$$\Delta\Phi_C \approx cd^{-\tau}, \quad (5)$$

где  $c = 6.63$ ,  $\tau = 1/2$  для случая  $A_1$  и  $c = 17.7$ ,  $\tau = 4/5$  для случая  $A_2$ . Подобное выражение можно получить и для заряженной полоски (случай  $B$ ). Вначале аппроксимируем минимальную энергию подзатворного состояния как функцию  $\Delta\Phi$ :

$$E_{G_0} \approx -a \cdot \Delta\Phi^b, \quad (6)$$

Тогда критическая разность потенциалов находится из выражения:

$$\Delta\Phi_C = a^{-\beta}, \quad \beta = 1/b. \quad (7)$$

Для  $6a^* \leq d \leq 12a^*$  можно положить  $a \approx 0.311 \cdot d^{-1/4}$ ,  $\beta \approx 0.9$ . В этом случае погрешность значения  $E_{G_0}$  вблизи критического потенциала составит не более 2%.

Для расчета энергий и волновых функций основного и первого возбужденного состояний использовался также вариационный метод, в котором пробная функция представлялась в виде:

$$\psi = C_D \psi_D + C_G \psi_G, \quad (8)$$

где  $C_D$ ,  $C_G$  – линейные вариационные параметры. В качестве  $\psi_D$  выбиралась волновая функция основного состояния изолированного донора, функция  $\psi_G$  может быть представлена в виде:

$$\psi_G(x, y, z) = z \exp(-\alpha x^2 - \beta y^2 - \gamma z^2), \quad (9)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  – вариационные параметры (в случаях  $A_1$ ,  $A_2$  и  $C$ , когда потенциал является осесимметричным,  $\alpha = \beta$ ). При таком выборе пробной функции погрешность энергии основного состояния составляет менее 1%. Чтобы получить такую же погрешность для энергии первого возбужденного состояния, можно в качестве  $\psi_G$  использовать линейную комбинацию двух функций вида (9):

$$\psi_G(x, y, z) = C_1 z \exp(-\alpha_1 x^2 - \beta_1 y^2 - \gamma_1 z^2) + C_2 z \exp(-\alpha_2 x^2 - \beta_2 y^2 - \gamma_2 z^2). \quad (10)$$

Использование пробных функций (9) – (10) позволяет достаточно точно оценить величину взаимодействия между соседними кубитами. Количественной мерой взаимодействия является интеграл перекрытия, который можно записать как  $S = \langle \psi_G(x, y, z) | \psi_G(x, y - R, z) \rangle$ , где  $R$  – расстояние между центрами соседних затворов. Величина перекрытия отражает, можно ли рассматривать электроны, расположенные вблизи затворов, в отдельности или они формируют двумерный электронный газ. В соответствии с [4], будем считать, что электронные волновые функции достаточно отделены друг от друга при  $S \leq 0.1$ . Как видно из рисунка 2, различия в величине перекрытия в случаях  $A_1$  и  $B$  имеют место только при небольших значениях  $\Delta\Phi$ . Для больших  $\Delta\Phi$  локализация электронной волновой функции определяется величиной  $d$ , и интеграл перекрытия незначительно отличается в случаях  $A_1$  и  $B$ .

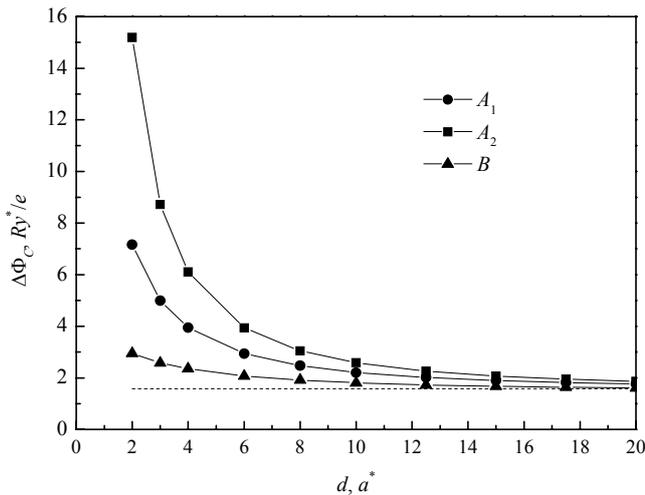


Рисунок 1 – Зависимость критической разности потенциалов от  $d$  (диаметра или ширины затвора). Для однородного электрического поля (пунктирная прямая) и заряженной полоски  $z_0 = 8a^*$

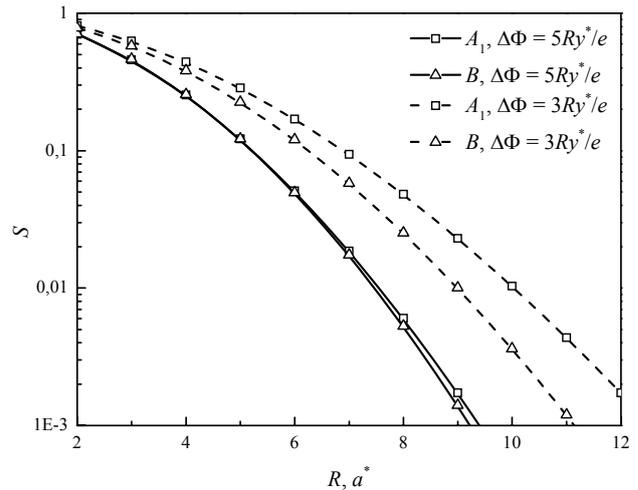


Рисунок 2 – Зависимость величины интеграла перекрытия от расстояния между центрами затворов,  $d = 4a^*$ ,  $z_0 = 8a^*$

- [1] T. Shinada, S. Okamoto, T. Kobayashi, I. Orhdomari. Nature **437**, 1128 (2005).  
 [2] P.M. Koenraad, M.E. Flatte. Nature materials **10**, 91 (2011).  
 [3] В.Е. Kane. Nature (London), **393**, 133 (1998).  
 [4] M. J. Calderon, B. Koiller, and S. Das Sarma. Phys. Rev. B, **75**, 125311 (2007).  
 [5] Е.А. Левчук, Л.Ф. Макаренко. Физика и техника полупроводников **50**, 89 (2016).  
 [6] Н.Н. Миролюбов, М.В. Костенко, М.Л. Левинштейн, Н.Н. Тиходеев. Методы расчета электростатических полей. Высшая школа, М. (1963). С. 164.  
 [7] <http://www.geuz.org>.