

Применение метода конечных элементов для моделирования состояний зарядового кубита на основе донора в кремнии

Е. А. Левчук

Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: liauchuk.alena@gmail.com

Рассмотрено применение метода конечных элементов для квантовомеханического моделирования электронных состояний вблизи поверхности полупроводника во внешнем электрическом поле. Разработана методика апостериорной оценки погрешности вычисления энергии. Получены зависимости критического потенциала, определяющего перемещение электрона от донора к затвору, от геометрических параметров системы. Изучено влияние размеров затвора на эффективность управления волновой функцией.

Ключевые слова: зарядовый кубит, волновая функция, донор, моделирование, энергетический уровень.

Введение

В настоящее время одними из наиболее перспективных физических объектов для реализации квантовых вычислений и квантовых средств связи являются одиночные атомы мелких примесей, размещенные на поверхности полупроводника. Примером такого объекта является квантовый процессор на основе примесных атомов фосфора в кремниевой матрице, который был предложен Кейном ([1]).

Одним из важных элементов этой реализации является возможность управления процессом ионизации одиночного донора, расположенного вблизи поверхности раздела сред, с помощью электрического поля. Проблема описания волновых функций и энергетического спектра донорного электрона приводит к задаче для стационарного уравнения Шредингера.

Влияние внешнего электрического поля на донорный электрон вблизи границы диэлектрик-полупроводник исследовалось ранее в работах в [2-3] с использованием метода Ритца с небольшим размером базиса. В работах [2-3] рассматривалось однородное внешнее электрическое поле, что соответствует затвору, представляющему собой бесконечную заряженную плоскость. На практике же предполагается реализация затвора конечных размеров. Этот вариант был рассмотрен в работах [4] (где рассматривался затвор в виде полосы конечной ширины, окруженный металлическим экраном, имеющим нулевой потенциал) и [5] (где затвор представлял собой тонкий круглый диск, находящийся в изотропном полупроводнике).

1. Постановка задачи

В данной работе рассматривалась система, в которой внешнее электрическое поле как полагалось однородным, так и считалось созданным дискообразным затвором. Область $z > 0$ полагалась заполненной полупроводником с диэлектрической проницаемостью ϵ_l , в плоскости $z = 0$ находился тонкий затвор в виде диска диаметра d , заряженный до потенциала Φ_0 . Центр диска находился в начале координат. На оси затвора на расстоянии z_0 от него находился донор. Предполагалось, что толщина диэлектрика (t_{ox}) между металлическим затвором и полупроводником настолько мала, что не влияет на распределение потенциала ($t_{ox} \rightarrow 0$), но при этом препятствует выходу электрона из полупроводника.

Для затвора конечных размеров рассматривались два типа граничных условий на поверхности $z = 0$. В первом случае считалось, что область $z < 0$ заполнена

диэлектриком. Во втором случае на участке границы $z = 0$, $\rho > d/2$ потенциал электрического поля полагался равным нулю, т.е. считалось, что затвор окружен заземленным металлическим экраном.

Электронные состояния рассматривались в приближении эффективной массы, которая считалась изотропной. Задача для уравнения Шредингера для волновой функции ψ и энергии E электрона при наличии вблизи границы донорного центра запишется в виде (ρ, z) - цилиндрические координаты):

$$\left(\hat{T} + \hat{V}_g + \hat{V}_D + \hat{V}_{D'} + \hat{V}_{im}\right)\psi = E\psi, \quad \rho > 0, z > 0, \quad (1)$$

$$\psi|_{z=0} = 0, \quad \rho > 0, \quad \left.\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right|_{\rho=0} = 0, \quad z > 0, \quad (2)$$

$$\psi \xrightarrow{\rho \rightarrow +\infty} 0, \quad z > 0, \quad \psi \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} 0, \quad \rho > 0. \quad (3)$$

Гамильтониан включает в себя следующие слагаемые: \hat{T} – оператор кинетической энергии, \hat{V}_D – потенциальная энергия взаимодействия электрона и донора, $\hat{V}_{D'}$ – потенциальная энергия взаимодействия электрона и изображения донора, \hat{V}_{im} – потенциальная энергия взаимодействия электрона со своим изображением, \hat{V}_g – потенциальная энергия электрона во внешнем поле.

Для случая, когда область $z < 0$ заполнена диэлектриком, формула для определения \hat{V}_g приведена в [6], если же диск окружен заземленным экраном - в [7].

Выражения для операторов $\hat{V}_{D'}$ и \hat{V}_{im} зависят от вида граничных условий на поверхности полупроводника.

2. Численное решение уравнения Шредингера

Для решения задачи (1) – (3) использовался метод конечных элементов. При этом неограниченная область $(0, +\infty) \times (0, +\infty)$, в которой определена задача, заменялась конечной областью $(0, L_\rho) \times (0, L_z)$, а волновая функция аппроксимировалась с помощью кусочно-линейных пробных функций на треугольной сетке. Погрешность вычислений сильно зависит от величины выбранной области.

Еще одним фактором, влияющим на погрешность метода, является дискретизация исходного уравнения. Относительная погрешность в энергии основного состояния, вызванная этим фактором, есть функция $O(h^2)$, где h - диаметр наибольшего элемента. Таким образом, при достаточно малых h погрешность можно считать равной Ch^2 , где C - некоторая константа.

Для оценки C вычислялась погрешность в энергии основного состояния относительно энергии, вычисленной на сетке с малым диаметром элемента h_0 . Аппроксимируя зависимость относительной погрешности от h , можно получить приближенное значение константы C . Графики функций вида Ch^2 , аппроксимирующие зависимость относительной погрешности от диаметра элемента, приведены пунктирными линиями на Рис 1. Таким образом, порядок относительной погрешности не превышает 10^{-3} .

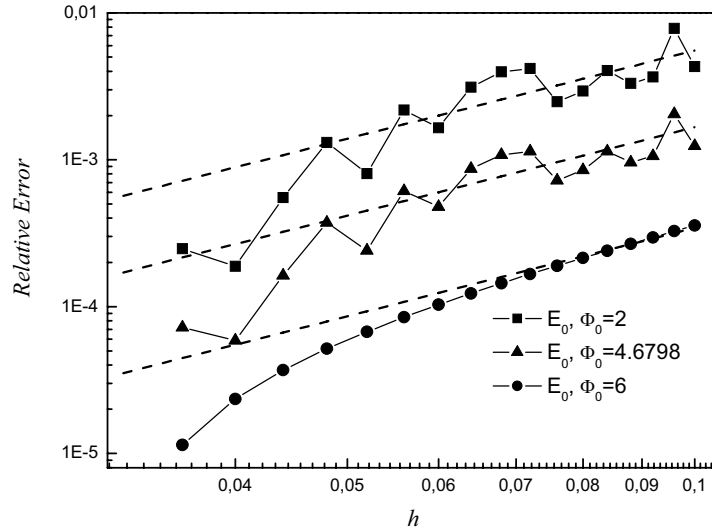


Рис. 1. Зависимость относительной погрешности энергии основного состояния от диаметра элемента для области размера $L_\rho = L_z = 10$; $d = 4$, $z_0 = 8$. Погрешность определялась относительно величины энергии, вычисленной на сетке с диаметром элемента $h_0 = 0.032$.

3. Результаты численного моделирования

Основной качественной характеристикой рассматриваемой системы является критический потенциал (Φ_{0c}) - потенциал на затворе, при котором происходит переход максимума квадрата волновой функции электрона от донора к затвору.

Для оценки критического потенциала в предельном случае, когда $z_0 \rightarrow +\infty$, рассмотрим задачу (1) – (3) при $\hat{V}_D = 0$ (т.е. в отсутствие потенциала взаимодействия электрона и донора), а также $\hat{V}_D = 0$ и $\hat{V}_{im} = 0$ (т.е. без учета влияния потенциала изображения). В этом случае зависимость энергии основного состояния от потенциала на затворе ($E_0^g(\Phi_0)$) для различных диаметров затвора можно найти с помощью зависимости $E_0^g(\Phi_0)$, полученной для $d = 1$. При достаточно больших z_0 критический потенциал может быть оценен точкой, в которой $E_0^g(\Phi_0) = -Ry^*$. Полученные таким образом значения критического потенциала представлены на Рис. 2 (кривая 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 Рис. 2).

С увеличением диаметра затвора, при одном и том же Φ_0 , увеличивается и ширина потенциальной ямы затвора, значит, уменьшается и энергия электрона в ней. Как следствие, до определенного предела с ростом d уменьшается критический потенциал, что соответствует результатам, полученным в [5]. Однако с некоторого момента увеличение d приведет к перекрытию потенциальных ям затвора и донора, что, в свою очередь, вызовет небольшой сдвиг критического потенциала в большую сторону. Как видно из Рис. 2, увеличение значения Φ_{0c} начинается при меньших диаметрах затвора для меньших z_0 , так как в этом случае потенциальные ямы находятся ближе друг к другу.

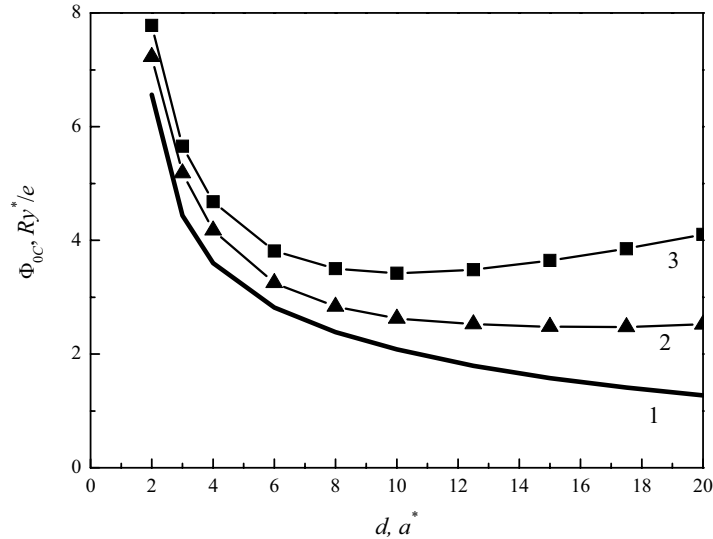


Рис. 2. Зависимость критического потенциала от диаметра затвора в случае, когда область $z < 0$ заполнена диэлектриком. Кривая 1 определена из уравнения $E_0^g(\Phi_0) = -Ry^*$, кривые 2 и 3 – как минимум разности энергий основного и первого возбужденного состояний для $z_0 = 16$ и $z_0 = 8$ соответственно.

Во многих работах, посвященных данной теме, внешнее электрическое поле предполагалось однородным, т.е. рассматривался предельный случай $d \rightarrow +\infty$. На Рис. 3 приведено сравнение энергетических уровней при однородном внешнем поле и в случае, когда внешнее поле создано затвором конечных размеров. Основным качественным различием случая конечного и бесконечного затвора является то, что для однородного внешнего электрического поля расстояние между точкой отталкивания первого возбужденного и основного состояний и точкой отталкивания первого и второго возбужденного состояний сильно сокращается (см. Рис. 3).

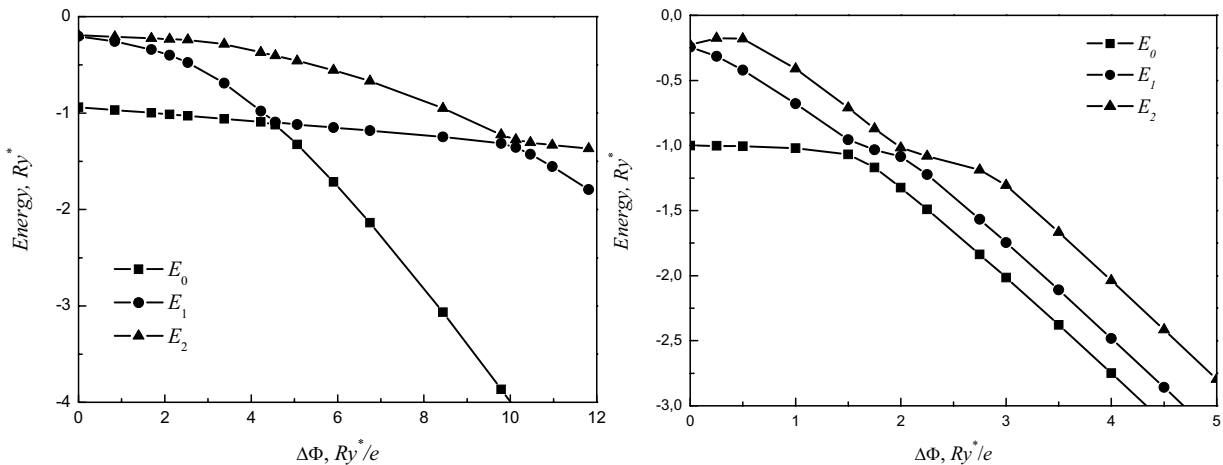


Рис. 3. Зависимость энергии основного, первого и второго возбужденного состояний от разности потенциалов на затворе и в точке расположения донора для затвора конечных размеров с $d = 4$, $z_0 = 8$ (слева) и для бесконечного затвора (справа).

Другим важным отличием является увеличение значения минимума разности между энергией первого возбужденного и основного состояниями. От величины этого минимума зависит вероятность туннелирования от донора к затвору.

Заклучение

В работе представлены результаты моделирования свойств зарядового кубита в кремнии с использованием метода конечных элементов. Было проведено исследование зависимости относительной погрешности от диаметра разбиения (h). Погрешность в собственных значениях есть функция Ch^2 , и полученные в работе зависимости позволяют приближенно определить константу C .

Были получены зависимости критического потенциала ионизации донора от диаметра затвора, создающего электрическое поле, а также от расстояния между донором и затвором. Проведено сравнение энергетических уровней в случае конечного размера затвора и в случае однородного внешнего поля. Установлено, что для однородного поля расстояния между точками квазипересечения электронных термов существенно меньше, чем в случае затвора конечных размеров.

Полученные результаты могут быть использованы при проектировании наноразмерных электронных устройств [8].

Литература

1. Kane, В.Е. A silicon-based nuclear spin quantum computer / В. Kane // Nature (London), 1998. – Vol. 393. – P. 133-137.
2. Calderon, M.J. Quantum control of donor electrons at the Si-SiO₂ interface / M.J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Physical Review Letters, 2006. – Vol. 96. – P. 096802.
3. Calderon, M.J. External field control of donor electron exchange at the Si/SiO₂ interface / M.J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Physical Review, 2007. – V. B75. – P. 125311.
4. 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.] // Physical Review, 2003. – Vol. B68. – P. 075317.
5. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G.D.J. Smit [et al.] // Physical Review, 2003. – Vol. B68. – P. 193302.
6. Смайт, В. Электростатика и электродинамика / В. Смайт. – М.: Издательство иностранной литературы, 1954. – 604 с.
7. Методы расчета электростатических полей / Н.Н. Миролюбов [и др.]. – М.: Государственное издательство «Высшая школа», 1963. – 415 с.
8. A single-atom transistor / M. Fuechsle // Nature Nanotechnology. – Nature Publishing Group, 2012. – Vol. 7, № 4. – С. 242-246.

Application of finite element method for modeling charge qubit states on based on the donor in silicon

E. A. Levchuk

Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: liauchuk.alena@gmail.com

The application of the finite element method for quantum-mechanical modeling of electron states near semiconductor surface in external electric field is considered. The technique of a posteriori error estimation of calculated energy is proposed. The dependence of the critical potential, that determines the electron shuttling between the donor and the interface, on geometrical parameters of the system is obtained. of the donor on geometrical parameters is obtained. The effect of gate size on the efficiency of control of the wave function.

Keywords: charge qubit, wave function, donor, modeling, energy level.