

ВЕСЦІ НАЦЫЯНАЛЬНАЙ АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСІ № 2 2016  
СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК

---

УДК 537.9

*Е. А. ЛЕВЧУК, Л. Ф. МАКАРЕНКО*

**ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЛОКАЛИЗАЦИЮ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ  
ЭЛЕКТРОНА В СИСТЕМЕ НАНОЗАТВОР–ДОНОР**

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,  
e-mail: liauchuk.alena@gmail.com, makarenko@bsu.by*

Проведено численное моделирование влияния магнитного поля на состояния мелкого донора, находящегося во внешнем электрическом поле дискообразного затвора. Для расчета энергий и волновых функций связанного электрона использовался метод конечных элементов. Получены характеристики, определяющие изменение локализации волновой функции основного состояния электрона в рассматриваемой системе, в зависимости от величины магнитного поля.

*Ключевые слова:* мелкий донор, нанозатвор, энергетический уровень, критический потенциал, энергетический зазор, численное моделирование.

*E. A. LEVCHUK, L. F. MAKARENKO*

**EFFECT OF A MAGNETIC FIELD ON ELECTRON WAVE FUNCTION RELOCATION  
IN NANOGATE–DONOR SYSTEM**

*Belarusian State University, Minsk, Belarus,  
e-mail: liauchuk.alena@gmail.com, makarenko@bsu.by*

Numerical modeling of magnetic field effect on the states of shallow donor, affected by external electric field of a disc-shaped gate, is carried out. Bound electron energies and wave functions are calculated using the finite element method. Characteristics of relocation of the ground state wave function from the donor to the gate are obtained as a function of magnetic field.

*Keywords:* shallow donor, nanogate, energy level, critical potential, energy gap, numerical modeling

**Введение.** Донорные примеси вблизи поверхности полупроводника, находящиеся под действием электрического и магнитного полей, могут использоваться как базовые элементы для построения квантового компьютера [1]. Однородное магнитное поле в этом случае необходимо для реализации спинового кубита, а также может применяться в качестве дополнительного управляющего параметра для контроля локализации электрона в системе донор–управляющий электрод (затвор) и степени перекрытия электронных волновых функций соседних кубитов [2].

Несмотря на большое число работ, посвященных моделированию состояний водородоподобного атома в однородном магнитном поле (см. обзор [3] и ссылки в нем), состояния донора, находящегося вблизи поверхности полупроводника под действием как электрического, так и магнитного полей, изучены все еще недостаточно. В статье [4] с помощью вариационного метода и метода конечных элементов исследовались состояния донора в магнитном поле вблизи поверхности полупроводника, но без учета электрического поля. Влияние и электрического, и магнитного полей на электронные состояния донора изучалось в работах [2, 5] с помощью вариационного метода. Однако внешнее электрическое поле в этих работах полагалось однородным, в то время как для более реалистичного моделирования системы требуется рассматривать неоднородное электрическое поле, созданное затвором конечных размеров. Влияние электрического поля такого типа рассматривалось в [6, 7], где, однако, не учитывалось наличие магнитного поля.

Целью данной работы является исследование задачи, возникающей при приложении внешнего магнитного поля к мелкому донору, находящемуся как в неоднородном электрическом поле на-

норазмерного затвора, так и в однородном электрическом поле. Основная характеристика, определяющая изменение локализации (передислокацию) волновой функции донорного электрона в подзатворную область в первом случае, – это критический потенциал на затворе  $\Phi_{0C}$  [6], во втором случае – критическое поле  $F_C$  [2, 5]. Другой характеристикой является минимальная величина энергетического зазора ( $g_{\min}$ ) между основным и первым возбужденным состояниями электрона, которая позволяет оценить время туннелирования электрона от донора к затвору [5, 8].

**1. Постановка задачи.** Будем рассматривать одиночный атом мелкого донора, расположенный вблизи поверхности полупроводника ( $z = 0$ ) в области  $z > 0$  на оси  $Oz$ . Расстояние от донора до поверхности полупроводника обозначим через  $z_0$ . Электрическое поле в полупроводнике создается расположенным на его поверхности тонким дискообразным затвором, имеющим диаметр  $d$ . Потенциал затвора обозначим через  $\Phi_0$ .

Ограничимся рассмотрением случая, когда внешнее однородное магнитное поле  $B$  направлено вдоль оси  $Oz$ . Тогда в рамках приближения эффективной массы состояния электрона описываются стационарным уравнением Шредингера для огибающей функции  $\Psi$  и энергии  $E$ , которое в безразмерной форме имеет вид

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

где  $\hat{V}_D$  – оператор кулоновского взаимодействия электрона и донора:

$$\hat{V}_D = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}}, \quad (2)$$

$\hat{V}_G$  – оператор потенциальной энергии электрона во внешнем электрическом поле. Аналитическое выражение для оператора  $\hat{V}_G$  приведено в [9, 10]. Уравнение (1) соответствует рассмотрению состояний с нулевым орбитальным моментом, что является достаточным для вычисления критического потенциала. Кроме этого, в уравнении (1) мы пренебрегаем вкладом потенциала изображения, поскольку, как показано в [9], заряды изображения не влияют на качественное поведение характеристик рассматриваемой системы. В качестве параметров безразмеривания используется эффективный борковский радиус  $a^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_s \hbar^2 / m^* e^2$  для длины, а для энергий – эффективный Ридберг  $Ry^* = m^* e^4 / 2\hbar^2 \epsilon_s^2$ .

В уравнение (1) входит безразмерное значение магнитного поля  $\mu$ , определяемое выражением

$$\mu = \frac{(a^*)^2}{\lambda_B^2} = \frac{B}{B_0}, \quad (3)$$

где магнитная длина определяется как  $\lambda_B = (\hbar / Be)^{1/2}$ , а характеристическое магнитное поле  $B_0$  как

$$B_0 = 2,35 \cdot 10^5 \left( \frac{m^*}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\epsilon_s^2} \text{ Тл.}$$

Кроме того, будем считать, что между затвором и полупроводником находится слой диэлектрика с бесконечно малой толщиной, создающий бесконечно высокий потенциальный барьер на границе, что приводит к граничному условию

$$\Psi|_{z=0} = 0. \quad (4)$$

Для связанных состояний также должны выполняться условия на бесконечности:

$$\Psi \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \rho \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty. \quad (5)$$

**2. Результаты численных расчетов.** Уравнение (1) с граничными условиями (4)–(5) решалось с помощью метода конечных элементов (МКЭ). При этом неограниченная область  $\rho > 0$ ,  $z > 0$ , на которой задано уравнение (1), заменялось ограниченной областью  $0 < \rho < L_\rho$ ,  $0 < z < L_z$ , а волновая функция аппроксимировалась с помощью кусочно-линейных пробных функций на треугольной сетке. Величины  $L_\rho$  и  $L_z$  выбирались из условия минимума энергии рассматриваемого состояния (как основного, так и возбужденных).

Поскольку все предыдущие исследования влияния магнитного поля на изменение локализации электрона вблизи поверхности полупроводника проводились, предполагая внешнее электрическое поле однородным, то желательно включить в последующее рассмотрение и этот случай. В нашей модели однородное электрическое поле является предельным случаем большого диаметра затвора, когда  $d \rightarrow \infty$ . Таким образом, в дальнейшем будем рассматривать как затвор конечного диаметра, так и затвор, занимающий всю плоскость  $xOy$ .

Переход от конечного затвора к бесконечному требует учета нескольких качественных различий. Во-первых, для случая затвора бесконечной площади (однородное электрическое поле) возникает проблема выбора нулевого уровня отсчета потенциала. Если для затвора конечной площади естественным является выбор нулевого потенциала на бесконечности, то, очевидно, это становится невозможным при  $d \rightarrow \infty$ . Как показано в [9], локализация волновой функции определяется не абсолютной величиной потенциала на затворе, а разностью потенциалов на затворе и в точке расположения донора  $\Delta\Phi = \Phi_0 - \Phi(0, z_0)$  (здесь  $\Phi(\rho, z)$  – распределение потенциала затвора в полупроводнике). Это позволяет сравнивать результаты расчетов для конечного и бесконечного затворов, если в обоих случаях мы условимся выбирать нулевой уровень потенциала внешнего электрического поля в точке расположения донора. Тогда в случае однородного поля потенциал будет определяться выражением

$$\hat{V}_G = -\frac{\Delta\Phi}{z_0}(z_0 - z), \quad (6)$$

а в случае затвора конечных размеров переопределим потенциал как

$$\tilde{\Phi}(\rho, z) = \Phi(\rho, z) - \frac{2\Phi_0}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{d}{2z_0}. \quad (7)$$

Аналогично, вместо критического потенциала  $\Phi_{0c}$  рассматривается критическая разность потенциалов  $\Delta\Phi_c$ . Такое переопределение потенциала внешнего поля для конечного затвора приводит лишь к необходимости пересчета значений энергии по формуле

$$\tilde{E} = E + \frac{2\Phi_0}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{d}{2z_0}. \quad (8)$$

При этом ход зависимостей уровней энергии от управляющего потенциала несколько изменяется, но разности между уровнями и, следовательно, положение точек квазипересечения (кривые 2, 2' и 3, 3' на рис. 1) остаются неизменными.

Как видно из рис. 1, при выборе нулевого уровня потенциала на бесконечности увеличение значения  $\Phi_0$  приводит к существенному понижению энергии основного состояния электрона, связанного с донором ( $E_{D0}$ ). При использовании же в качестве потенциальной энергии  $\tilde{\Phi}(\rho, z)$  мы наблюдаем лишь незначительные изменения  $E_{D0}$ . То есть практически все наблюдаемое понижение энергии основного состояния до точки квазипересечения было связано со вторым слагаемым в равенстве (8), а кинетическая энергия связанного с донором электрона изменяется очень мало.

Для конечного затвора (кривые 2, 2' и 3, 3', 3'' на рис. 1) хорошо видны изломы, соответствующие точкам квазипересечения энергетических уровней. После прохождения точек квазипересечения изменяется структура волновых функций, соответствующих близким уровням энергии. Точка  $B$  на кривых 2, 2' определяет критический потенциал, соответствующий передислокации

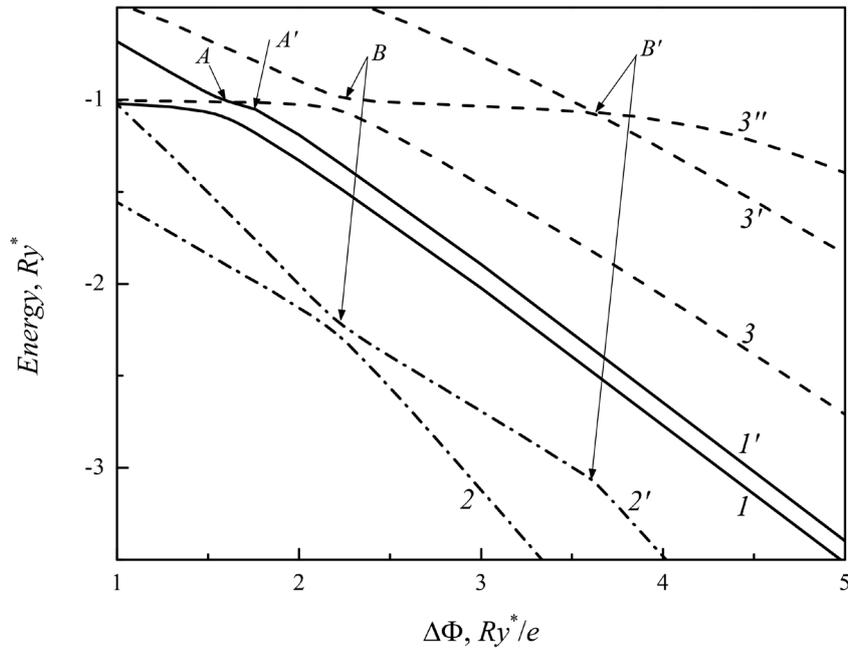


Рис. 1. Энергии основного (кривые 1, 2, 3), первого (кривые 1', 2', 3') и второго (кривая 3'') возбужденных состояний электрона в системе донор–затвор в зависимости от разности потенциалов  $\Delta\Phi = \Phi_0 - \Phi(0, z_0)$ . Кривые 1, 1' представляют энергии при однородном внешнем электрическом поле, кривые 2, 2', 3, 3', 3'' – энергии при диаметре затвора  $d = 10a^*$ . Кривые 2, 2' соответствуют случаю, когда нулевой уровень потенциала затвора выбирается на бесконечности, кривые 3, 3', 3'' – когда нулевой уровень потенциала затвора выбирается на доноре. Расстояние от донора до затвора  $z_0 = 8a^*$

волновой функции от донора к затвору. В следующей точке  $B'$  происходит квазипересечение уровней энергии  $1s$ -состояния вблизи донора и  $2\sigma$ -состояния вблизи затвора.

Аналогичная картина наблюдается и в случае бесконечного затвора при достаточно больших значениях  $z_0$ , однако при значениях  $z_0$ , представляющих интерес для исследования, она приобретает более сложный вид. Как видно из рис. 1, при  $z_0 = 8a^*$  область квазипостоянного значения  $E_1$  между соседними точками  $A$  и  $A'$  (кривые 1, 1') практически отсутствует. При меньших значениях  $z_0$  нахождение точки квазипересечения становится весьма затруднительным. В этом случае возникают проблемы с определением критического потенциала по нахождению точки с минимальным значением зазора  $g_{\min}$ , как это делалось ранее в работах [2, 5]. Также с уменьшением  $z_0$  становится невозможно и само определение понятия минимального зазора. При таких значениях  $z_0$  происходит плавная передислокация волновой функции связанного электрона от донора к затвору [6]. В дальнейшем мы будем рассматривать только такие значения  $z_0$ , при которых еще можно пользоваться понятием минимального зазора  $g_{\min}$ .

Кривые 3, 3' на рис. 1 показывают, что  $\Delta\Phi_c$  в отсутствие магнитного поля можно найти как точку пересечения кривой энергии основного состояния вблизи затвора и кривой энергии основного состояния изолированного донора (т. е.  $E = -1Ry^*$ ) [9]. Аналогичное справедливо и для  $\mu > 0$ , однако тогда энергия основного состояния изолированного донора зависит от величины магнитного поля. Поэтому исследуем отдельно связанные состояния в квантовой яме, создаваемой полем затвора при  $z_0 \rightarrow \infty$ . Такую систему можно рассматривать как изолированную электрически индуцированную квантовую точку. Стационарное уравнение Шредингера для такого объекта будет совпадать с уравнением (1), в котором предполагается, что  $\hat{V}_D = 0$ .

Наличие магнитного поля приводит к «сжатию» волновых функций рассматриваемой системы в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, что, в свою очередь, увеличивает энергию основного состояния (рис. 2). Как следует из рисунка, скорость изменения  $E_0$  с ростом магнитного поля зависит от диаметра затвора. Это приводит к тому, что при значениях

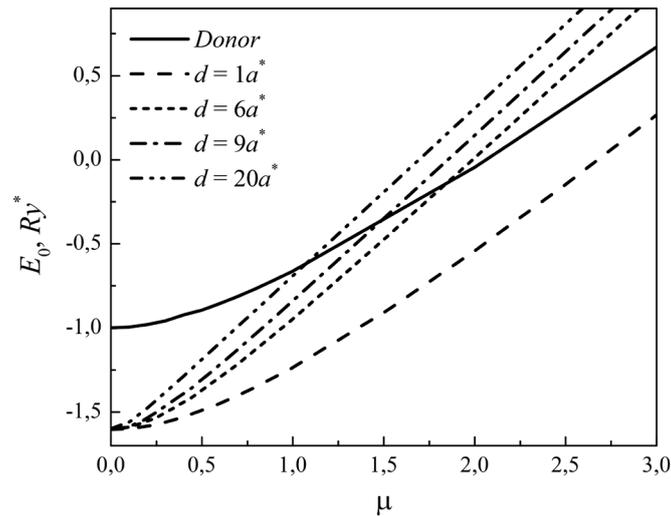


Рис. 2. Изменение энергии основного состояния электрона в электрически индуцированной квантовой точке с ростом величины магнитного поля (пунктирные кривые) для различных диаметров затвора; сплошная кривая соответствует энергии основного состояния электрона в поле изолированного донора [11]

потенциала на затворе, незначительно превышающих критическое значение, включение магнитного поля может приводить к обратной передислокации волновой функции электрона от затвора к донору, что показано на рис. 3. Этот эффект становится более заметным при возрастании диаметра затвора.

На рис. 4 приведены результаты расчетов исследования влияния магнитного поля на  $\Delta\Phi_C$  и  $g_{\min}$  при конечном  $z_0$  для различных значений диаметра затвора. Как видно, критическая разность потенциалов монотонно увеличивается с ростом магнитного поля, причем скорость увеличения  $\Delta\Phi_C$  практически не зависит от диаметра затвора при  $d \geq 6a^*$ .

В то же время в этом интервале значений диаметра затвора наблюдается качественное изменение хода  $g_{\min}$  с увеличением поля. Если для меньших значений диаметра имеет место монотонное уменьшение  $g_{\min}$ , то при увеличении  $d$  в области  $0 < \mu < 1$  может происходить увеличение  $g_{\min}$ . Наиболее сильно немонотонность зависимости  $g_{\min}(\mu)$  наблюдается для случая  $d \rightarrow \infty$ .

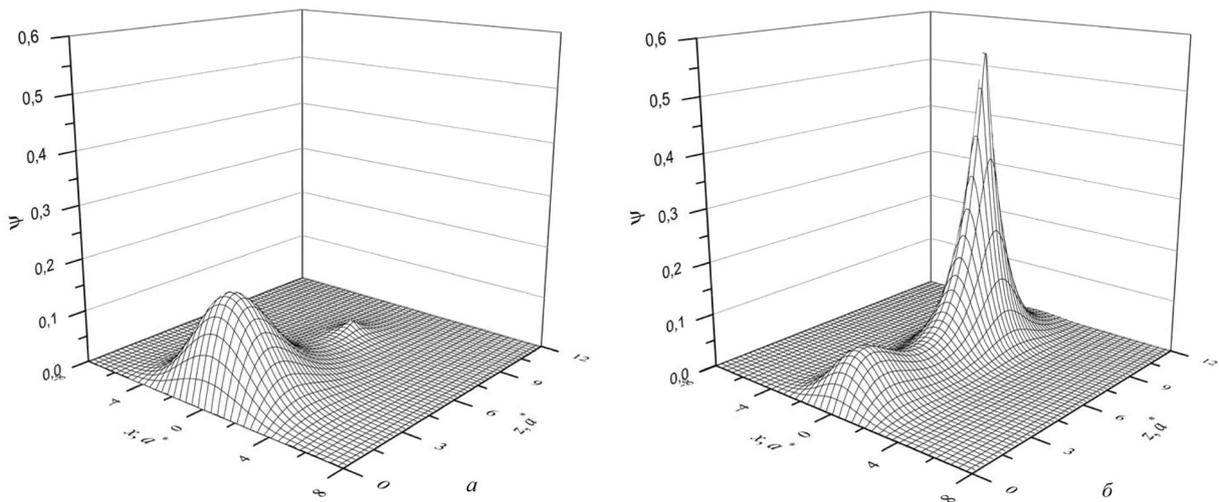


Рис. 3. Изменение локализации волновой функции основного состояния электрона при включении магнитного поля: приведены нормированные волновые функции для диаметра затвора  $d = 6a^*$ , расположения донора в точке  $z_0 = 8a^*$  и потенциала на затворе  $\Phi_0 = 4,5 Ry^*/e$  в отсутствие магнитного поля (а) и при приложении магнитного поля, соответствующего  $\mu = 1$  (б)

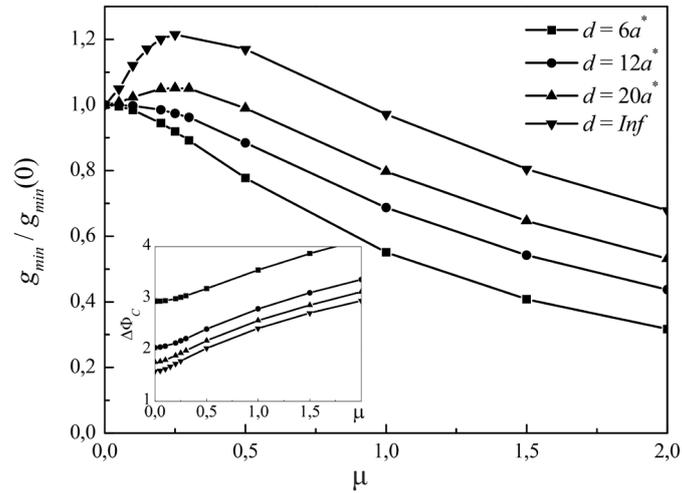


Рис. 4. Энергетический зазор между основным и первым возбужденным состояниями ( $g_{\min}$ ) в зависимости от величины магнитного поля для различных диаметров затвора; расстояние между донором и затвором составляет  $z_0 = 8a^*$ ; значение  $g_{\min}$  нормировано на величину энергетического зазора при нулевом магнитном поле ( $g_{\min}(0)$ ). На вставке – зависимость критической разности потенциалов от магнитного поля для соответствующих значений  $d$

Увеличение  $\Delta\Phi_C$  легко объяснимо на основании данных, приведенных на рис. 2, где видна разница между скоростями увеличения энергий основного состояния электрона, локализованного на доноре, и в электрически индуцированной квантовой точке. Немонотонность изменения  $g_{\min}$ , по-видимому, связана с влиянием магнитного поля на локализацию волновых функций этих состояний.

**3. Вариационный расчет влияния магнитного поля на критические параметры.** Как было показано в [9], зависимости  $E_0$  и  $E_1$  от  $\Phi_0$  для затвора конечных размеров хорошо воспроизводятся вариационным методом с использованием пробных функций вида

$$\Psi_{DG0} = C_D \Psi_{D0} + C_G \Psi_{G0}. \quad (9)$$

Представление пробной функции в виде (9) использовалось ранее для расчетов критических параметров также и для случая однородного электрического поля [2, 5].

Сравнение с результатами, полученными методом МКЭ, показало, что функция  $\Psi_{D0}$  при не слишком малых значениях  $z_0$  ( $z_0 \geq 4-5a^*$ ) во внешнем электрическом поле хорошо аппроксимируется суммой

$$\Psi_{D0} = A_1 \exp(-r) + A_2 z \exp(-r). \quad (10)$$

Коэффициенты  $A_1$  и  $A_2$  зависят от величины внешнего электрического поля вблизи донора и являются вариационными параметрами. В работах [2, 5] в качестве  $\Psi_{D0}$  использовался лишь второй член в правой части равенства (10). Однако очевидно, что этот член неправильно описывает характер зависимости донорной волновой функции при приложении внешнего электрического поля.

Вид функции  $\Psi_{G0}$  для затвора конечных размеров определялся в [9] путем сравнения с результатами расчетов МКЭ. Было найдено, что результаты расчетов  $E_0$  и  $E_1$  методом МКЭ хорошо воспроизводятся при выборе пробной функции  $\Psi_{G0}$  в виде

$$\Psi_{G0}(\rho, z) = N_G z \left( e^{-\alpha_1 \rho^2 - \beta_1 z^2} + C_r e^{-\alpha_2 \rho^2 - \beta_2 z^2} \right), \quad (11)$$

где выражения для зависимостей параметров  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $C_r$  от  $\Phi_0$  описаны ранее в работе [9].

Для выбора оптимального вида функции  $\psi_{G0}$  в случае однородного электрического поля была использована аналогичная процедура сравнения результатов расчета стандартным вариационным методом с результатами расчетов с помощью МКЭ. Поиск  $\psi_{G0}$  проводился среди функций вида

$$\psi_{l_1 l_2} = z^{l_1} \exp(-\beta z^{l_2} - \gamma \rho^2). \quad (12)$$

Оказалось, что для расчета энергий наиболее удачными будут значения параметров  $l_1 = 1$  и  $l_2 = 2$ . В работах [2, 5] для расчета  $\Delta\Phi_C$  и  $g_{\min}$  используются другие значения  $l_1 = 2$  и  $l_2 = 1$ , которые, однако, приводят к более высоким погрешностям при вычислении значений  $E_1$  (и, следовательно,  $g_{\min}$ ). Отметим также, что разница между результатами расчетов стандартным вариационным методом и методом МКЭ для однородного поля существенно уменьшается, если в качестве  $\psi_{G0}$  взять сумму из двух функций вида (12), т. е. когда  $\psi_{G0}$  имеет такой же вид, как и в случае конечного затвора, но вариационные параметры  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $C_r$  для случая бесконечного затвора требуют нового определения.

Изменение волновой функции при приложении магнитного поля хорошо описывается умножением обоих слагаемых (9)  $\psi_{D0}$  и  $\psi_{G0}$  на множитель вида  $\exp(-\kappa\rho^2)$ , как это было предложено для изучения влияния магнитного поля на основное состояние изолированного донора в объеме полупроводника [12]. То есть при наличии магнитного поля результирующую пробную функцию можно представить в виде

$$\psi_{\mu} = C_D \psi_{D0} \exp(-\kappa_D \rho^2) + C_G \psi_{G0} \exp(-\kappa_G \rho^2). \quad (13)$$

Параметры  $\kappa_D$  и  $\kappa_G$  могут быть определены независимо друг от друга. Для определения параметра  $\kappa_D$  достаточно рассмотреть изолированный донор в объеме полупроводника. А для определения  $\kappa_G$  можно использовать результаты расчетов в случае  $z_0 \rightarrow \infty$ . При этом  $\kappa_G$  в общем случае зависит от диаметра затвора и его потенциала, а для однородного поля – только от расстояния от донора до поверхности.

Использование функции (13) позволяет с небольшой погрешностью воспроизвести результаты расчета энергии (см. рис. 4) методом конечных элементов. Кроме этого их можно использовать для качественного анализа закономерностей функционирования кубита, предложенного в работе [1].

**Заключение.** В работе приведены результаты численного моделирования влияния магнитного поля на состояния электрона, который находится в электрическом поле, создаваемом кулоновским центром и дискообразным затвором. Изучено влияние магнитного поля на характеристические параметры, определяющие передислокацию волновой функции электрона от донора к затвору. На основании результатов численных расчетов с помощью метода конечных элементов предложены пробные функции для вариационного метода, которые позволяют с достаточной точностью рассчитать не только критический потенциал, но и величину энергетического зазора, определяющего скорость туннелирования от донора к затвору. Показано, что для больших размеров затвора имеет место немонотонная зависимость величины энергетического зазора между основным и первым возбужденным состояниями системы от магнитного поля.

### Список использованной литературы

1. Kane, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B. E. Kane // Nature (London). – 1998. – Vol. 393. – P. 133–137.
2. Calderon, M. J. Quantum control of donor electrons at the Si-SiO<sub>2</sub> interface / M. J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 96. – 096802.
3. Лисица, В. С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода / В. С. Лисица // Успехи физ. наук. – 1987. – Т. 153, № 11. – С. 379–421.

4. Effect of a perpendicular magnetic field on the shallow donor states near a semiconductor-metal interface / Bin Li [et al.] // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 87. – 075313.
5. Calderon, M. J. External field control of donor electron exchange at the Si/SiO<sub>2</sub> interface / M. J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 75. – 125311.
6. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G. D. J. Smit [et al.] // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – 193302.
7. 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.
8. Martins, A. S. Electric-field control and adiabatic evolution of shallow donor impurities in silicon / A. S. Martins, R. B. Capaz, B. Koiller // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69. – 085320.
9. Левчук, Е. А. Управление электронными состояниями мелкого донора при помощи металлического затвора конечных размеров / Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко // Физика и техника полупроводников. – 2016. – Т. 50, № 1. – С. 89–96.
10. Смайт, В. Электростатика и электродинамика / В. Смайт. – М.: Изд-во иностр. лит., 1954.
11. Praddaude, H. C. Energy levels of hydrogenlike atoms in a magnetic field / H. C. Praddaude // Phys. Rev. A. – 1972. – Vol. 6, N 4. – P. 1321–1324.
12. Показилов, Е. П. Вариационный расчет энергетических уровней водородоподобной системы в магнитном поле / Е. П. Показилов, М. М. Русанов // Физика твердого тела. – 1968. – Т. 10, № 10. – С. 3117–3119.

*Поступила в редакцию 20.04.2016*