

ISSN 1816-0301 (print)

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ****MATHEMATICAL MODELING**

УДК 537.9

Поступила в редакцию 03.10.2017

Received 03.10.2017

**Е. А. Левчук<sup>1</sup>, С. В. Лемешевский<sup>2</sup>, Л. Ф. Макаренко<sup>1</sup>**<sup>1</sup>*Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь*<sup>2</sup>*Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь***ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В МДП-СТРУКТУРЕ С ОДИНОЧНЫМ ДОНОРОМ**

**Аннотация.** Проводится численное моделирование эволюции электронных состояний под действием неоднородного внешнего электрического поля в структуре металл-диэлектрик-полупроводник (МДП-структуре) при наличии одиночного донорного центра. В качестве источника электрического поля рассматривается нанометровый дискообразный затвор, для расчета потенциала которого решается задача для уравнения Лапласа в многослойной среде. Энергетический спектр связанного электрона находится из задачи для стационарного уравнения Шредингера. Для решения обеих задач строятся разностные схемы. Разностная схема для уравнения Шредингера учитывает неаналитичность волновой функции в точке расположения донора. При решении задачи для уравнения Лапласа предлагаются асимптотические граничные условия, аппроксимирующие потенциал внешнего поля на больших расстояниях от затвора в различных слоях, что позволяет существенно уменьшить расчетную область. Исследуется влияние этих граничных условий на точность вычисления потенциала и энергий. С помощью построенных разностных схем рассчитываются зависимости энергетического спектра связанного электрона от потенциала на затворе, определяются значения критического потенциала, при котором происходит передислокация волновой функции электрона. На основании результатов вычислений устанавливается, что управляющим параметром для описания поведения электрона является разность потенциалов между донором и поверхностью полупроводника. Показывается, что критическая разность потенциалов практически не зависит от толщины и проницаемости диэлектрического слоя.

**Ключевые слова:** метод конечных разностей, МДП-структура, уравнение Шредингера, нанозатвор, энергетический уровень, численное моделирование

**Для цитирования.** Левчук, Е. А. Использование метода конечных разностей для расчета электронных состояний в МДП-структуре с одиночным донором / Е. А. Левчук, С. В. Лемешевский, Л. Ф. Макаренко // Информатика. – 2018. – Т. 15, № 1. – С. 7–20.

**E. A. Levchuk<sup>1</sup>, S. V. Lemeshevskii<sup>2</sup>, L. F. Makarenko<sup>1</sup>**<sup>1</sup>*Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus*<sup>2</sup>*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus***THE USE OF THE FINITE DIFFERENCE METHOD FOR CALCULATION OF ELECTRONIC STATES IN MIS-STRUCTURE WITH SINGLE DONOR**

**Abstract.** Numerical modeling of electronic state evolution due to non-uniform external electric field in the structure metal-insulator-semiconductor with solitary donor center is carried out. Considering a nanometer disc-shaped gate as a source of the electric field, the problem for the Laplace equation in multilayered medium is solved numerically to determine the distribution of the gate potential. The energy spectrum of a bound electron is calculated from the problem for the stationary Schrödinger equation. Finite difference schemes are constructed to solve both the problems. Difference scheme for the Schrödinger equation takes into account cusp condition for the wave function at the donor location. To solve the problem for the Laplace equation, asymptotic boundary conditions for approximating the external field potential at large distances from the gate in different layers are suggested. These conditions allow to reduce the calculation domain for the electrostatic problem essentially. The effect of the boundary conditions on the accuracy of calculating the potential and energies is

investigated. Using the developed difference schemes, the dependences of the energy spectrum of the bound electron on the gate potential are calculated, and the values of critical potential at which the wave function of the electron is relocated are determined. It has been found on the basis of calculation results, that governing parameter for the description of electronic behavior is the potential difference between the donor and semiconductor surface. It has been shown that critical potential difference does not depend on dielectric thickness and permittivity.

**Keywords:** finite difference method, MIS-structure, Schrödinger equation, nanogate, energy level, numerical modeling

**For citation.** Levchuk E. A., Lemeshevskii S. V., Makarenko L. F. The Use of the Finite Difference Method for Calculation of Electronic States in MIS-Structure with Single Donor. *Informatics*, 2018, vol. 15, no. 1, pp. 7–20 (in Russian).

**Введение.** Чувствительность электрических, оптических и магнитных свойств полупроводников к легирующим примесям широко используется для создания различных полупроводниковых приборов и устройств. Уменьшение физических размеров рабочих областей приборов привело к необходимости учета квантовых эффектов при проектировании и оптимизации современных полупроводниковых структур [1]. Более того, достижения технологии изготовления приборов позволяют создавать структуры, в рабочей области которых находится всего лишь один атом примеси. Это дало возможность создавать неклассические устройства, принцип работы которых основан на влиянии одиночных примесных атомов на электрофизические свойства этих устройств [2]. Создание таких устройств требует проведения дополнительных фундаментальных исследований, посвященных моделированию их физических свойств с учетом квантово-механических эффектов.

Одним из предложений по использованию одиночных атомов примесей являлась физическая реализация кубита на основе ядерного спина примеси фосфора в кремнии [3], электронного спина связанного электрона [4] или его заряда [5]. Это стимулировало появление ряда работ, посвященных моделированию управления волновой функцией связанного электрона для кубита на основе донора вблизи поверхности полупроводника [6–13]. Основное внимание в этих работах уделялось управлению электронной плотностью на доноре при помощи внешнего электрического поля, когда расчетными характеристиками рассматриваемых систем являются так называемое критическое поле [9, 10] или критический потенциал на затворе [6], соответствующие передислокации волновой функции донорного электрона в подзатворную область. Так, в работе [6] на основе вариационного метода решения стационарного уравнения Шредингера исследовано влияние положения донора и размеров затвора на характеристики управления волновой функцией. В работе [7] подобная задача решалась также с помощью вариационного метода, но уже при другой геометрической конфигурации затвора и других граничных условиях для управляющего внешнего поля. В работах [8–12] в отличие от [6, 7] при расчетах учитывались дополнительно потенциалы изображения донора и электрона, однако при этом площадь затвора считалась бесконечно большой и, соответственно, изучался лишь случай однородного электрического поля в подзатворной области.

Учет всех особенностей системы: конечности размеров затвора, наличия слоя диэлектрика конечной (ненулевой) толщины, различия диэлектрических проницаемостей полупроводника и диэлектрика – требует решения задачи для уравнения Лапласа с целью расчета потенциала в многослойной среде. В результате возникает необходимость использования численных методов, в частности метода конечных разностей (МКР), который показал свою эффективность при решении подобных задач [14]. Ранее в работах [15, 16] сделаны попытки применения МКР для моделирования наноразмерных систем с одиночными донорами. Однако в этих работах рассматривались идеализированные структуры, в которых ограничивающий внешний потенциал имеет достаточно простой вид и может быть задан в аналитическом виде. В таких случаях достаточно лишь построения численного решения для уравнения Шредингера.

Целью настоящей работы является разработка алгоритма численного моделирования состояний электрона в МДП-структуре с одиночным донором в подзатворной области на основе последовательного решения задач для уравнения Лапласа и стационарного уравнения Шредингера. Для расчета потенциала затвора, волновых функций и энергетических уровней применялся МКР. Результаты расчетов с использованием МКР сравнивались с результатами, полученными с помощью метода конечных элементов (МКЭ).

**Постановка задачи.** Рассмотрим однозарядный донор, находящийся в полупроводнике на расстоянии  $z_0$  от границы раздела полупроводник-диэлектрик. Внешнее электрическое поле создается бесконечно тонким дискообразным затвором диаметром  $d$ , имеющим потенциал  $\Phi_0$ . Слой диэлектрика, отделяющий затвор от полупроводника, расположен в области  $-t_{ox} < z < 0$ . Донор и центр затвора находятся на оси  $Oz$  (рис. 1).

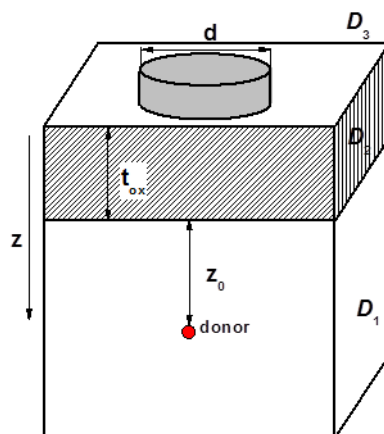


Рис. 1. Схема моделируемой системы

В рамках приближения эффективной массы энергия  $E$  и волновая функция электрона  $\Psi$  для состояний с нулевым значением проекции орбитального момента импульса на ось  $Oz$  описываются задачей для стационарного уравнения Шредингера (в цилиндрических координатах  $(\rho, z, \varphi)$ ):

$$(\hat{T} + \hat{V})\Psi = E\Psi, \quad \rho > 0, \quad z > 0, \quad (1)$$

где  $\hat{T}$  – оператор кинетической энергии,  $\hat{V}$  – оператор потенциальной энергии.

В уравнении (1) при введении безразмерных параметров будем использовать эффективный боровский радиус в качестве единицы длины:

$$a^* = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_1\hbar^2}{m^*e^2} \quad (2)$$

и эффективный ридберг в качестве единицы энергии:

$$Ry^* = \frac{\hbar^2}{2m^*(a^*)^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1} \frac{e^2}{2a^*}, \quad (3)$$

где  $m^*$  – эффективная масса электрона в полупроводнике,  $\epsilon_1$  – диэлектрическая проницаемость полупроводника,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  – постоянная Планка,  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная,  $e$  – элементарный заряд. Потенциал, соответственно, измеряется в единицах  $Ry^*/e$ .

В уравнении (1) оператор кинетической энергии  $\hat{T}$  определяется выражением

$$\hat{T} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (4)$$

Оператор потенциальной энергии  $\hat{V}$  представляет собой сумму

$$\hat{V} = \hat{V}_D + \hat{V}_{D'} + \hat{V}_{sim} + \hat{V}_G,$$

где  $\hat{V}_D$  – оператор взаимодействия между электроном и донором:

$$\hat{V}_D = -\frac{2}{\sqrt{(z-z_0)^2 + \rho^2}}; \quad (5)$$

$\hat{V}_{D'}$ ,  $\hat{V}_{sim}$  – операторы взаимодействия электрона с зарядами изображения донора и своим изображением соответственно [12]:

$$\hat{V}_{D'} = -\frac{2Q^*}{\sqrt{(z+z_0)^2 + \rho^2}} + \frac{8\varepsilon_1\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(P^*)^{k-1}}{\sqrt{(z+z_0 + 2kt_{ox})^2 + \rho^2}}; \quad (6)$$

$$\hat{V}_{sim} = \frac{Q^*}{2z} - \frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(P^*)^{k-1}}{z + kt_{ox}}, \quad (7)$$

где  $t_{ox}$  – толщина слоя диэлектрика между полупроводником и затвором,

$$Q^* = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}; \quad P^* = Q^* \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2}. \quad (8)$$

В формулах (6)–(8) через  $\varepsilon_1$  обозначена диэлектрическая проницаемость в области  $z > 0$ , заполненной полупроводником (область  $D_1$  на рис. 1), через  $\varepsilon_2$  – диэлектрическая проницаемость в области  $-t_{ox} < z < 0$  (область  $D_2$  на рис. 1), через  $\varepsilon_3$  – диэлектрическая проницаемость в области  $z < -t_{ox}$  (область  $D_3$  на рис. 1):

$$\varepsilon(\rho, z) = \begin{cases} \varepsilon_1, & (\rho, z) \in (0, +\infty) \times (0, +\infty) = D_1, \\ \varepsilon_2, & (\rho, z) \in (0, +\infty) \times (-t_{ox}, 0) = D_2, \\ \varepsilon_3, & (\rho, z) \in (0, +\infty) \times (-\infty, -t_{ox}) = D_3. \end{cases} \quad (9)$$

Оператор  $\hat{V}_G = -u(\rho, z)$  описывает внешнее электрическое поле, создаваемое затвором, где потенциал затвора  $u(\rho, z)$ , который в каждой из областей  $D_k$  будем обозначать через  $u_k(\rho, z)$ , является решением следующей задачи:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial u_k}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 u_k}{\partial z^2} = 0, \quad (\rho, z) \in D_k, \quad k = 1, 2, 3; \quad (10)$$

$$u_1|_{z=0} = u_2|_{z=0}, \quad \varepsilon_1 \frac{\partial u_1}{\partial z} \Big|_{z=0} = \varepsilon_2 \frac{\partial u_2}{\partial z} \Big|_{z=0}, \quad \rho > 0; \quad (11)$$

$$u_2|_{z=-t_{ox}} = u_3|_{z=-t_{ox}}, \quad \varepsilon_2 \frac{\partial u_2}{\partial z} \Big|_{z=-t_{ox}} = \varepsilon_3 \frac{\partial u_3}{\partial z} \Big|_{z=-t_{ox}}, \quad \rho > d/2; \quad (12)$$

$$u|_{z=-t_{ox}} = \Phi_0, \quad \rho < d/2; \quad (13)$$

$$\frac{\partial u_k}{\partial \rho} \Big|_{\rho=0} = 0, \quad k = 1, 2, 3; \quad (14)$$

$$u_k \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \rho \rightarrow +\infty, \quad k = 1, 2, 3; \quad (15)$$

$$u_1 \rightarrow 0 \text{ при } z \rightarrow +\infty, \quad u_3 \rightarrow 0 \text{ при } z \rightarrow -\infty, \quad (16)$$

$$u(\rho, z) = u_k(\rho, z) \text{ при } (\rho, z) \in D_k, \quad k = 1, 2, 3.$$

На границе полупроводника предполагается наличие бесконечно высокого потенциального барьера, что позволяет записать граничное условие для волновой функции в виде

$$\Psi|_{z=0} = 0. \quad (17)$$

Для связанных состояний также выполняется условие на бесконечности

$$\Psi \rightarrow 0 \text{ при } \rho \rightarrow \infty, \quad z \rightarrow \infty. \quad (18)$$

В точках на оси  $\rho = 0$  вне точки расположения донора волновая функция должна быть непрерывно дифференцируема, поэтому

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0, \quad z \neq z_0. \quad (19)$$

В точке расположения донора условие (19) не выполняется, так как в этой точке потенциал в уравнении Шредингера обращается в бесконечность. Путем разложения решения  $\Psi(r, \theta)$  в ряд вблизи точки  $\rho = 0, z = z_0$

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \Psi_l(r) P_l(\cos \theta),$$

где  $\rho = r \sin \theta, z = z_0 + r \cos \theta, P_l$  – полиномы Лежандра, можно получить условие

$$\left( \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \Psi \right) \Big|_{r=0} = A \cos \theta,$$

где  $A$  – некоторая постоянная. Вывод этого условия аналогичен случаю однородного внешнего поля [17]. Выбирая направление вдоль  $\theta = \pi/2$  (перпендикулярно оси  $\rho = 0$ ), получаем в точке расположения донора условие

$$\left( \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \Psi \right) \Big|_{\rho=0} = 0, \quad z = z_0. \quad (20)$$

### Расчет потенциала затвора

**Аппроксимация краевых условий на границе расчетной области.** Для численного расчета потенциала неограниченная область  $\rho > 0, -\infty < z < +\infty$ , на которой поставлена задача, заменялась конечной областью  $0 < \rho < L_\rho, -L_{z3} < z < L_{z1}$ . Условия на границе расчетной области задавались исходя из предположения, что на больших расстояниях потенциал затвора можно приближенно полагать равным потенциалу точечного заряда  $q$ , расположенного в центре затвора. Этот потенциал, который в каждой из областей  $D_k$  будем обозначать через  $v_k(\rho, z)$ , определяется выражениями

$$v_1(\rho, z) = \frac{q}{\pi \varepsilon_0 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3)(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(P^*)^k}{\sqrt{(z + t_{ox}(2k+1))^2 + \rho^2}}, \quad z > 0; \quad (21)$$

$$v_2(\rho, z) = \frac{q}{2\pi\epsilon_0(\epsilon_2 + \epsilon_3)} \left( \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(P^*)^k}{\sqrt{(z+t_{ox}(2k+1))^2 + \rho^2}} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{Q^*(P^*)^k}{\sqrt{(z-t_{ox}(2k+1))^2 + \rho^2}} \right), \quad -t_{ox} < z < 0; \quad (22)$$

$$v_3(\rho, z) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0\epsilon_3} \left( \frac{2\epsilon_3}{\epsilon_2 + \epsilon_3} \frac{1}{\sqrt{(z+t_{ox})^2 + \rho^2}} - \frac{4\epsilon_2\epsilon_3}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{Q^*(P^*)^{k-1}}{\sqrt{(z-t_{ox}(2k-1))^2 + \rho^2}} \right), \quad z < -t_{ox}. \quad (23)$$

Выражения (21)–(23) выведены с использованием преобразования Фурье – Бесселя в соответствии с методом, описанным в [18].

Дифференцируя выражения (21)–(23), получаем на границах расчетной области условия третьего рода:

$$\left( \frac{\partial u_1}{\partial z} + \xi_1(\rho) u_1 \right) \Big|_{z=L_{z1}} = 0, \quad \rho > 0, \quad \text{где } \xi_1(\rho) = -\frac{1}{v_1(\rho, L_{z1})} \cdot \frac{\partial v_1(\rho, L_{z1})}{\partial z}; \quad (24)$$

$$\left( \frac{\partial u_3}{\partial z} + \xi_3(\rho) u_3 \right) \Big|_{z=-L_{z3}} = 0, \quad \rho > 0, \quad \text{где } \xi_3(\rho) = -\frac{1}{v_3(\rho, -L_{z3})} \cdot \frac{\partial v_3(\rho, -L_{z3})}{\partial z}; \quad (25)$$

$$\left( \frac{\partial u_k}{\partial \rho} + \eta_k(z) u_k \right) \Big|_{\rho=L_\rho} = 0, \quad z \in R, \quad \text{где } \eta_k(z) = -\frac{1}{v_k(L_\rho, z)} \cdot \frac{\partial v_k(L_\rho, z)}{\partial \rho}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (26)$$

**Разностная схема для расчета потенциала.** Аппроксимация задачи (10)–(14), (24)–(26) с помощью МКР строилась на сетке  $\Omega_L$ , которая определялась следующим образом:

$$\omega_\rho = \left\{ \rho_i = ih_\rho : h_\rho = \frac{L_\rho}{N_\rho}, \quad i = \overline{0, N_\rho} \right\},$$

$$\omega_z^{(1)} = \left\{ z_j^{(1)} = jh_z^{(1)} : h_z^{(1)} = \frac{L_{z1}}{N_z^{(1)}}, \quad j = \overline{0, N_z^{(1)}} \right\},$$

$$\omega_z^{(2)} = \left\{ z_j^{(2)} = jh_z^{(2)} - t_{ox} : h_z^{(2)} = \frac{t_{ox}}{N_z^{(2)}}, \quad j = \overline{0, N_z^{(2)} - 1} \right\},$$

$$\omega_z^{(3)} = \left\{ z_j^{(3)} = -L_{z3} + jh_z^{(3)} : h_z^{(3)} = \frac{L_{z3} - t_{ox}}{N_z^{(3)}}, \quad j = \overline{0, N_z^{(3)} - 1} \right\},$$

где  $h_\rho$  – шаг сетки,  $N_\rho$  – количество узлов сетки по переменной  $\rho$ ;  $h_z^{(k)}$  – шаг сетки,  $N_z^{(k)}$  – количество узлов сетки по переменной  $z$  в каждой из областей. Тогда

$$\Omega_L = \omega_\rho \times (\omega_z^{(1)} \cup \omega_z^{(2)} \cup \omega_z^{(3)}).$$

Значения потенциала в узлах сетки:

$$y_{ij}^{(k)} = u_k(\rho_i, z_j^{(k)}), \quad k = 1, 2, 3.$$

Во внутренних узлах каждой из подобластей уравнение (10) аппроксимировалось выражением [14]

$$\frac{1}{\rho_i} (\rho_{i+1/2} y_\rho^{(k)})_{\bar{\rho}} + y_{\bar{z}}^{(k)} = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (27)$$

На затворе значение потенциала определено точно:

$$y_{i,0}^{(2)} = \Phi_0, \quad i = \overline{0, N_d}, \quad (28)$$

где  $N_d = \lceil d/2h_p \rceil$ . Условия сопряжения на границах раздела сред со вторым порядком можно аппроксимировать выражением [14]

$$\varepsilon_k \frac{y_{i,1}^{(k)} - y_{i,0}^{(k)}}{h_z^{(k)}} - \varepsilon_{k+1} \frac{y_{i,0}^{(k)} - y_{i, N_z^{(k+1)}-1}^{(k+1)}}{h_z^{(k+1)}} + \frac{\varepsilon_k h_z^{(k)} + \varepsilon_{k+1} h_z^{(k+1)}}{2} \frac{\rho_{i+1/2} (y_{i+1,0}^{(k)} - y_{i,0}^{(k)}) - \rho_{i-1/2} (y_{i,0}^{(k)} - y_{i-1,0}^{(k)})}{\rho_i h_p^2} = 0, \quad (29)$$

где  $i = \overline{1, N_p - 1}$  при  $k = 1$  и  $i = \overline{N_d + 1, N_p - 1}$  при  $k = 2$ .

Для аппроксимации условия (14) со вторым порядком воспользуемся тем, что при  $\rho \rightarrow 0$  уравнение (10) будет иметь вид [14]

$$2 \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0. \quad (30)$$

Уравнение (30) используется для повышения порядка аппроксимации условия (14):

$$\frac{y_{1,j}^{(k)} - y_{0,j}^{(k)}}{h_p} + \frac{h_p}{4} \frac{y_{0,j+1}^{(k)} - 2y_{0,j}^{(k)} + y_{0,j-1}^{(k)}}{(h_z^{(k)})^2} = 0, \quad j = \overline{1, N_z^{(k)} - 1}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (31)$$

Для получения второго порядка аппроксимации условий (24)–(26) вводятся дополнительные узлы сетки вне расчетной области. С помощью этих узлов в граничных точках аппроксимируются условия (24)–(26) и уравнение (10), из которых затем исключаются дополнительные узлы. Например, для аппроксимации условия (24) на границе  $z = L_{z1}$  вводятся дополнительные узлы  $y_{i, N_z^{(1)}+1}^{(1)}$ , с помощью которых получаем

$$\frac{y_{i, N_z^{(1)}+1}^{(1)} - y_{i, N_z^{(1)}-1}^{(1)}}{2h_z^{(1)}} + \xi_1(\rho_i) \frac{y_{i, N_z^{(1)}+1}^{(1)} + y_{i, N_z^{(1)}-1}^{(1)}}{2} = 0, \quad i = \overline{1, N_p - 1}. \quad (32)$$

С помощью соотношения (27) в граничных узлах  $(i, N_z^{(1)})$  исключаются  $y_{i, N_z^{(1)}+1}^{(1)}$ :

$$\left( -\frac{2}{h_p} - \frac{2}{(h_z^{(1)})^2} \right) y_{i, N_z^{(1)}}^{(1)} + \frac{\rho_{i+1/2}}{\rho_i h_p^2} y_{i+1, N_z^{(1)}}^{(1)} + \frac{\rho_{i-1/2}}{\rho_i h_p^2} y_{i-1, N_z^{(1)}}^{(1)} + \left( 1 - \frac{h_z^{(1)} \xi_1(\rho_i) - 1}{h_z^{(1)} \xi_1(\rho_i) + 1} \right) \frac{y_{i, N_z^{(1)}-1}^{(1)}}{(h_z^{(1)})^2} = 0, \quad (33)$$

$$i = \overline{1, N_p - 1}.$$

Аналогичным образом получаем условия на границах  $z = -L_{z3}$  и  $\rho = L_p$ :

$$\left( -\frac{2}{h_p} - \frac{2}{(h_z^{(3)})^2} \right) y_{i,0}^{(3)} + \frac{\rho_{i+1/2}}{\rho_i h_p^2} y_{i+1,0}^{(3)} + \frac{\rho_{i-1/2}}{\rho_i h_p^2} y_{i-1,0}^{(3)} + \left( 1 - \frac{h_z^{(3)} \xi_3(\rho_i) + 1}{h_z^{(3)} \xi_3(\rho_i) - 1} \right) \frac{y_{i,1}^{(3)}}{(h_z^{(3)})^2} = 0, \quad i = \overline{1, N_p - 1}; \quad (34)$$

$$\left( -\frac{2}{h_p} - \frac{2}{(h_z^{(k)})^2} \right) y_{N_p, j}^{(k)} + \left( \frac{\rho_{N_p-1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} - \frac{\rho_{N_p+1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} \frac{h_p \eta_k(z_j^{(k)}) - 1}{h_p \eta_k(z_j^{(k)}) + 1} \right) y_{N_p-1, j}^{(k)} + \frac{1}{(h_z^{(k)})^2} y_{N_p, j-1}^{(k)} + \frac{1}{(h_z^{(k)})^2} y_{N_p, j+1}^{(k)} = 0, \quad j = \overline{1, N_z^{(k)} - 1}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (35)$$

а также в угловых точках расчетной области и в точках пересечения границ расчетной области с границами раздела сред:

$$\left( -\frac{2}{h_p} - \frac{h_p}{2(h_z^{(1)})^2} \right) y_{0,N_z^{(1)}}^{(1)} + \frac{1}{h_p} y_{1,N_z^{(1)}}^{(1)} + \frac{h_p}{4(h_z^{(1)})^2} \left( 1 - \frac{h_z^{(1)} \xi_1(0) - 1}{h_z^{(1)} \xi_1(0) + 1} \right) y_{0,N_z^{(1)}-1}^{(1)} = 0; \quad (36)$$

$$\left( -\frac{2}{h_p} - \frac{h_p}{2(h_z^{(3)})^2} \right) y_{0,0}^{(3)} + \frac{1}{h_p} y_{1,0}^{(3)} + \frac{h_p}{4(h_z^{(3)})^2} \left( 1 - \frac{h_z^{(3)} \xi_3(0) + 1}{h_z^{(3)} \xi_3(0) - 1} \right) y_{0,1}^{(3)} = 0; \quad (37)$$

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{2}{h_p} - \frac{2}{(h_z^{(1)})^2} \right) y_{N_p, N_z^{(1)}}^{(1)} + \left( \frac{\rho_{N_p-1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} - \frac{\rho_{N_p+1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} \frac{h_p \eta_1(L_{z1}) - 1}{h_p \eta_1(L_{z1}) + 1} \right) y_{N_p-1, N_z^{(1)}}^{(1)} + \\ & + \frac{1}{(h_z^{(1)})^2} \left( 1 - \frac{h_z^{(1)} \xi_1(L_p) - 1}{h_z^{(1)} \xi_1(L_p) + 1} \right) y_{N_p, N_z^{(1)}-1}^{(1)} = 0; \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{2}{h_p} - \frac{2}{(h_z^{(3)})^2} \right) y_{N_p, 0}^{(3)} + \left( \frac{\rho_{N_p-1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} - \frac{\rho_{N_p+1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} \frac{h_p \eta_3(-L_{z3}) - 1}{h_p \eta_3(-L_{z3}) + 1} \right) y_{N_p-1, 0}^{(3)} + \\ & + \left( 1 - \frac{h_z^{(3)} \xi_3(L_p) + 1}{h_z^{(3)} \xi_3(L_p) - 1} \right) \frac{y_{N_p, 1}^{(3)}}{(h_z^{(3)})^2} = 0; \end{aligned} \quad (39)$$

$$\frac{y_{1,0}^{(1)} - y_{0,0}^{(1)}}{h_p} + \frac{h_p}{2} \frac{1}{\varepsilon_1 h_z^{(1)} + \varepsilon_2 h_z^{(2)}} \left( \varepsilon_1 \frac{y_{0,1}^{(1)} - y_{0,0}^{(1)}}{h_z^{(1)}} - \varepsilon_2 \frac{y_{0,0}^{(1)} - y_{0, N_z^{(2)}-1}^{(2)}}{h_z^{(2)}} \right) = 0; \quad (40)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_k \frac{y_{N_p, 1}^{(k)} - y_{N_p, 0}^{(k)}}{h_z^{(k)}} - \varepsilon_{k+1} \frac{y_{N_p, 0}^{(k)} - y_{N_p, N_z^{(k)}-1}^{(k)}}{h_z^{(k+1)}} + \frac{\varepsilon_k h_z^{(k)} + \varepsilon_{k+1} h_z^{(k+1)}}{h_p^2} y_{N_p, 0}^{(k)} + \\ & + \frac{\varepsilon_k h_z^{(k)} + \varepsilon_{k+1} h_z^{(k+1)}}{2} \left( \frac{\rho_{N_p-1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} - \frac{\rho_{N_p+1/2}}{\rho_{N_p} h_p^2} \frac{h_p \eta_k(\alpha_k) - 1}{h_p \eta_k(\alpha_k) + 1} \right) y_{N_p-1, 0}^{(k)} = 0, \quad \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = -t_{\alpha x}, \quad k = 1, 2. \end{aligned} \quad (41)$$

Для решения задачи (10)–(14), (24)–(26) помимо МКР применялся также МКЭ с кусочно-линейными пробными функциями на треугольной сетке, использованный в работе [19]. При этом для сравнения с МКР, а также для определения зависимости погрешности от размеров элементов сетка для МКЭ выбиралась таким образом, чтобы ее узлы совпадали с узлами сетки МКР.

**Численное решение задачи для уравнения Шредингера.** Как и в случае расчета потенциала, при решении задачи для уравнения Шредингера неограниченная область  $\rho > 0$ ,  $z > 0$  заменялась ограниченной областью  $0 < \rho < L_p$ ,  $0 < z < L_{z1}$ . Поскольку имеет место экспоненциальное убывание волновой функции на бесконечности, на границе расчетной области задавались нулевые граничные условия для волновой функции, т. е. граничное условие (18) заменялось условиями

$$\Psi|_{z=L_{z1}} = 0, \quad \Psi|_{\rho=L_p} = 0. \quad (42)$$



Решение уравнения Шредингера строилось на сетке

$$\Omega_S = \omega_\rho \times \omega_z^{(1)}.$$

Значения волновой функции в узлах сетки

$$w_{ij} = \Psi(\rho_i, z_j^{(1)}). \quad (43)$$

Во внутренних точках сетки  $(i, j)$  уравнение Шредингера аппроксимировалось разностным уравнением

$$-\frac{1}{\rho_i} \left( \rho_{i+1/2} w_\rho \right)_\rho - w_{zz} + V_{ij} w = E_h w, \quad (44)$$

где  $E_h$  – приближенное значение энергии,  $V_{ij} = \hat{V}(\rho_i, z_j^{(1)})$ .

На границах  $z = 0$ ,  $z = L_{z1}$ ,  $\rho = L_\rho$  задавались нулевые граничные условия:

$$w_{i,0} = 0, \quad i = \overline{0, N_\rho}; \quad (45)$$

$$w_{i, N_z^{(1)}} = 0, \quad i = \overline{0, N_\rho}; \quad (46)$$

$$w_{N_\rho, j} = 0, \quad j = \overline{1, N_z^{(1)} - 1}. \quad (47)$$

На границе  $\rho = 0$  при  $z \neq z_0$  для повышения порядка аппроксимации граничного условия (19) использовалась разностная аппроксимация уравнения Шредингера на оси  $\rho = 0$ :

$$w_\rho + \frac{h_\rho}{4} (w_{zz} - V_{0j} w + E_h w) = 0, \quad j \neq j_0, \quad i = 0, \quad (48)$$

где  $(0, j_0)$  – точка расположения донора. Значение волновой функции в точке расположения донора определялось из аппроксимации второго порядка для условия (20):

$$3w_{0, j_0} = 4w_{1, j_0} - w_{2, j_0} + 2h_\rho w_{0, j_0}. \quad (49)$$

В результате аппроксимации (44)–(49) получаем матричную задачу на собственные значения, решение которой находилось численно.

Аналогично расчету потенциала затвора при решении задачи для уравнения Шредингера с помощью МКЭ использовались кусочно-линейные пробные функции на элементах, представляющих собой прямоугольные треугольники. Узлы сетки для МКЭ выбирались таким образом, чтобы они совпадали с узлами сетки для МКР.

**Погрешность вычисления энергии.** Погрешности вычисления энергии будут различными, когда электрон находится в подзатворной области и когда он расположен вблизи донора. В первом случае на погрешность влияет как ошибка вычисления потенциала, так и ошибка решения уравнения Шредингера.

Для оценки погрешности вычисления потенциала, возникающей в результате введения ограниченной расчетной области и задания на ее границах условий третьего рода (24)–(26), рассмотрим тестовую задачу, в которой бесконечно тонкий диск находится в однородной среде или на границе двух однородных сред. В этом случае известно точное аналитическое выражение для потенциала [18]:

$$u(\rho, z) = \frac{2\Phi_0}{\pi} \arctg \left( \frac{d}{2} \sqrt{\frac{2}{\rho^2 + (z + t_{ox})^2 - \frac{d^2}{4} + \left( \left( \rho^2 + (z + t_{ox})^2 - \frac{d^2}{4} \right)^2 + d^2 (z + t_{ox})^2 \right)^{1/2}}} \right). \quad (50)$$

Расчеты распределения потенциала с помощью МКР проводились для трех модельных задач с различными условиями на границе расчетной области. В первой задаче значение потенциала на границе полагалось равным нулю, во второй задаче потенциал на границе задавался по формуле (50), и в третьей задаче на границе задавались условия (24)–(26). Полученные во всех трех случаях решения сравнивались с точным значением потенциала, рассчитанным по формуле (50), в интегральной норме на области  $0 < \rho < 10a^*$ ,  $-10a^* < z < 10a^*$ . Вычисления для диаметра затвора  $d = 6a^*$  показали, что относительная погрешность потенциала для  $L = L_\rho = L_{z1} = L_{z3}$  в диапазоне от  $10a^*$  до  $40a^*$  и шага сетки  $h = h_\rho = h_z^{(k)} = 0,1$  при граничных условиях (24)–(26) изменяется незначительно и составляет  $\sim 0,043$ . Погрешность же при использовании на границе условий, рассчитанных по выражению (50), т. е. точных граничных условий, составляет от  $\sim 0,023$  при  $L = 10a^*$  до  $\sim 0,038$  при  $L = 40a^*$ . Это показывает, что применение условий (24)–(26) не приводит к значительному росту погрешности даже при небольших размерах расчетной области. В то же время при использовании нулевых граничных условий на границе расчетной области погрешность вычислений заметно увеличивается: при  $L = 10a^*$  она составляет  $\sim 0,57$ . Таким образом, условия (24)–(26) позволяют достичь приемлемых значений погрешности вычисления потенциала даже при относительно небольших размерах расчетной области.

Влияние погрешностей вычисления потенциала на значения энергии можно оценить на рис. 2. На нем показаны зависимости энергии основного состояния от шага сетки, когда использовалось аналитическое выражение для потенциала (50) (ExactPot, кривые 1, 2) и когда потенциал определялся численно с условиями (24)–(26) (NumerPot, кривые 1', 2'). Расчет энергии проводился с помощью МКЭ и МКР. Из вставки на рис. 2 видно, что расчетное значение энергии представляется в виде

$$E(h) \approx E^* + Bh^2, \quad (51)$$

где  $E^*$  можно рассматривать как оценку точного значения энергии. Формула (51) справедлива как для МКЭ [20], так и для МКР, причем полученные значения  $E^*$  в обоих случаях практически совпадают. Следует отметить, что МКЭ (как и всякий вариационный метод) дает оценку энергии сверху, в то время как МКР – снизу.

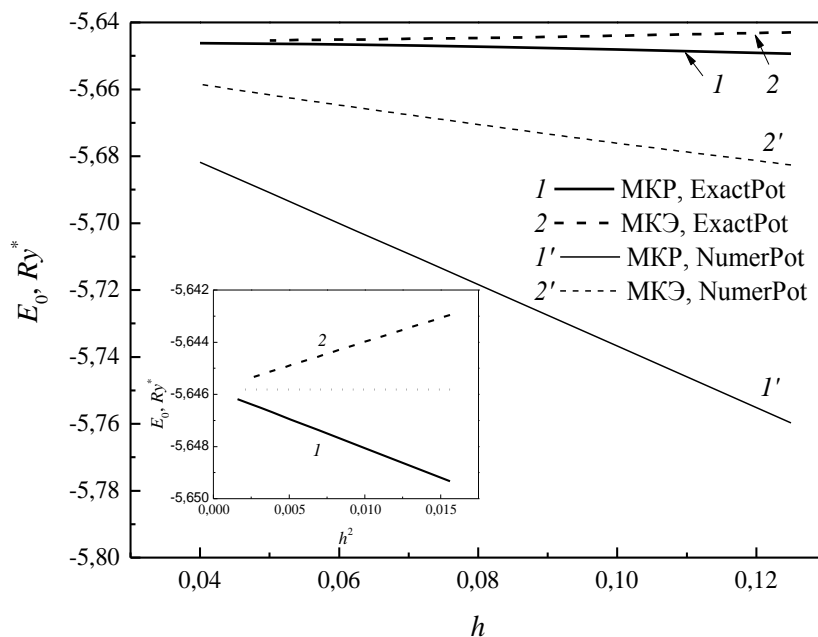


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния ( $E_0$ ) электрона в поле затвора от шага сетки при нулевой толщине слоя диэлектрика. Диаметр затвора  $d = 6a^*$ , потенциал на затворе  $\Phi_0 = 10Ry^*/e$ .

На вставке – зависимость энергии основного состояния, рассчитанная с использованием точного значения потенциала (50), от квадрата шага сетки. Точками показано значение энергии, вычисленное путем экстраполяции

На рис. 2 также видно, что погрешность вычисления потенциала, возникающая вследствие применения сеточных методов, приводит к снижению значений энергии как в случае МКР, так и в случае МКЭ. При этом погрешность, связанная с ошибкой вычисления потенциала, существенно больше, чем погрешность, возникающая при численном решении уравнения Шредингера. Тем не менее использование экстраполяции дает в обоих случаях близкие значения для  $E^*$ , которые практически совпадают со значением  $E^*$ , полученным ранее при точном задании потенциала по формуле (50).

Случай, когда электрон локализован на доноре, рассмотрим в отсутствие внешнего поля затвора и изображений. Тогда в точке расположения донора потенциал в уравнении Шредингера обращается в бесконечность, что может приводить к возникновению дополнительных погрешностей. Для того чтобы проверить влияние условия (20) на точность вычислений, были проведены расчеты зависимости энергии основного состояния донора от шага сетки в задаче с условием (20) и с условием (19) в точке расположения донора. На рис. 3 видно, что использование условия (19) в точке расположения донора приводит к появлению дополнительных флуктуаций погрешности, вызванных положением точки расположения донора ( $\rho = 0, z = z_0$ ) относительно сетки. Таким образом, использование условий (20) оказывает существенное влияние на точность вычислений.

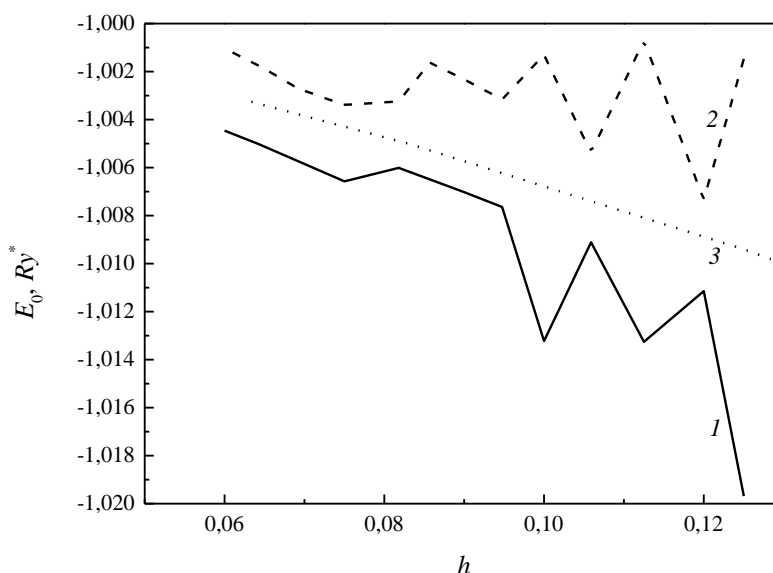


Рис. 3. Влияние сингулярности потенциала на результаты вычисления энергии основного состояния донора ( $E_0$ ), находящегося на расстоянии  $z_0 = 8a^*$  от поверхности полупроводника, при нулевом потенциале на затворе и без учета потенциала изображений;  $h$  – шаг сетки. Кривые 1, 2 рассчитаны с помощью МКР и МКЭ соответственно с использованием условий (19) в точке расположения донора, кривая 3 рассчитана с помощью МКР с использованием условия (20)

**Результаты численного эксперимента.** Одной из основных характеристик, определяющих функционирование рассматриваемой структуры, является значение внешнего электрического поля, при котором происходит изменение относительной доли электронной плотности в основном состоянии вблизи донора и в подзатворной области. Обозначим критический потенциал затвора, при котором происходит передислокация электронной плотности от донора к затвору, как  $\Phi_{0c}$ . Критический потенциал зависит от ряда параметров системы: размера затвора, положения донора, диэлектрической проницаемости сред, толщины слоя диэлектрика. Ранее было исследовано влияние диаметра затвора и положения донора на критический потенциал при нулевой толщине диэлектрика [19], в настоящей работе основное внимание уделяется изучению влияния толщины слоя диэлектрика и его диэлектрической проницаемости.

В [19] было показано, что критическое поле соответствует минимуму разности между энергиями первого возбужденного и основного состояний ( $E_1 - E_0$ ). Поэтому для определения  $\Phi_{0c}$  достаточно рассчитать значения энергии двух состояний, что существенно упрощает задачу.

Обычно при моделировании подобных систем нулевой уровень потенциала выбирается на бесконечности. Однако в [21] для сравнения случаев затвора конечного размера и однородного внешнего поля нулевой уровень внешнего потенциала выбирался не на бесконечности, а в точке расположения донора. В рассматриваемом случае такой выбор нулевого уровня приведет к тому, что потенциал в уравнении (1) необходимо будет переопределить в соответствии с выражением

$$\hat{V}'(\rho, z) = \hat{V}(\rho, z) - \hat{V}_G(0, z_0) - \hat{V}_{D'}(0, z_0) - \hat{V}_{sim}(0, z_0).$$

В результате изменятся также и значения рассчитанных энергий электрона:

$$\tilde{E} = E - \hat{V}_G(0, z_0) - \hat{V}_{D'}(0, z_0) - \hat{V}_{sim}(0, z_0). \quad (52)$$

Полученные таким образом зависимости пересчитанных энергий основного, первого и второго возбужденных состояний от потенциала на затворе показаны на рис. 4 для двух значений диэлектрической проницаемости изолирующего слоя:  $\epsilon_2 = 3,8$  и  $\epsilon_2 = 34,2$ .

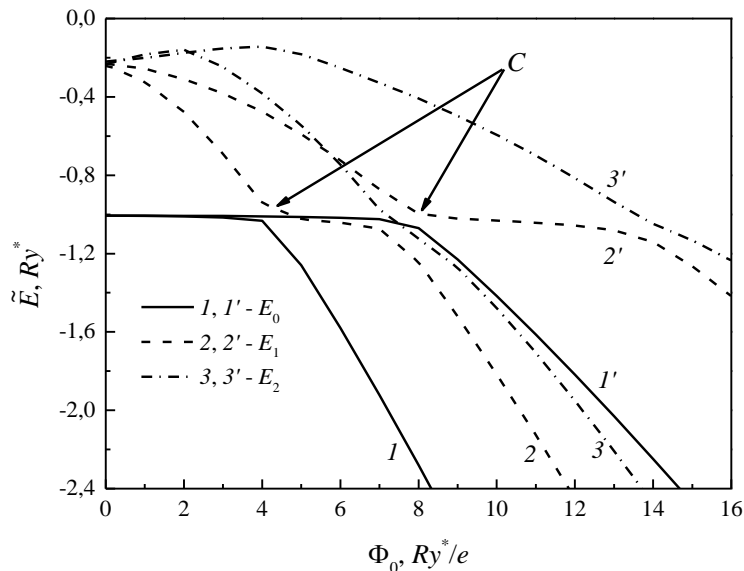


Рис. 4. Зависимости энергий основного ( $E_0$ ), первого ( $E_1$ ) и второго ( $E_2$ ) возбужденных состояний от величины потенциала на затворе для различных значений проницаемости слоя диэлектрика:  $\epsilon_2 = 34,2$  – кривые 1, 2, 3;  $\epsilon_2 = 3,8$  – кривые 1', 2', 3'. Диаметр затвора  $d = 6a^*$ , толщина диэлектрика  $t_{ox} = 1d^*$ ,  $\epsilon_1 = 11,4$ ,  $\epsilon_3 = 1$

Выбор нулевого уровня потенциала на доноре позволяет упростить анализ результатов расчетов. Например, в случае, когда электрон локализован на доноре, энергия  $\tilde{E}$  остается практически постоянной и составляет  $-1Ry^*$ . Кроме этого, облегчается определение точки квазипересечения основного и первого возбужденных состояний (точки C на рис. 4), а значит, и величины критического потенциала, для чего достаточно использовать лишь значения энергии электрона в поле затвора в отсутствие донора [19].

Зависимости критического потенциала от толщины слоя диэлектрика, определенного из положения точки минимума разности  $E_1 - E_0$ , приведены на рис. 5. Из рисунка видно, что критический потенциал с увеличением толщины диэлектрика возрастает быстрее при меньших значениях  $\epsilon_2$ . Так, при  $t_{ox} = 2a^*$  ( $\approx 6,3$  нм в кремнии)  $\Phi_{0C} \approx 231$  мВ для  $\epsilon_2 = 3,8$  и  $\Phi_{0C} \approx 95$  мВ для  $\epsilon_2 = 34,2$ . Отсюда следует, что при использовании диэлектрика с меньшей диэлектрической проницаемостью для функционирования устройства требуется приложение к затвору большего потенциала, что дополнительно увеличивает вероятность пробоя диэлектрика.

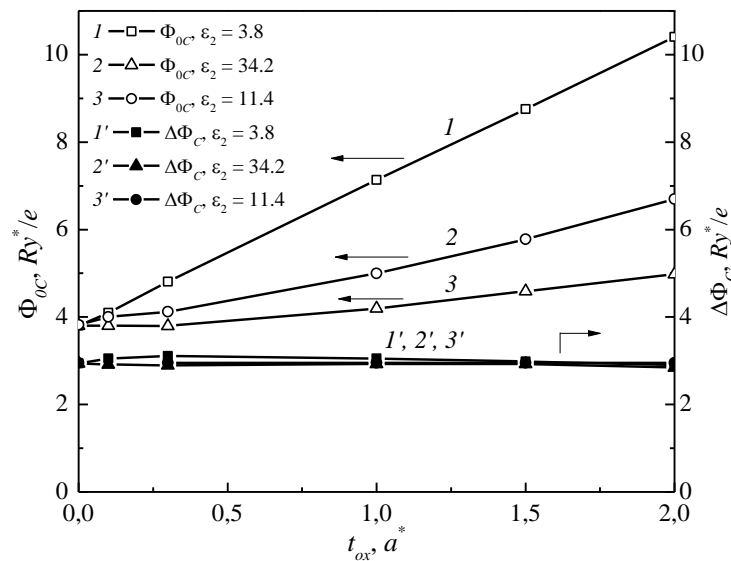


Рис. 5. Зависимость критического потенциала ( $\Phi_{0C}$ ) и критической разности потенциалов ( $\Delta\Phi_C$ ) от толщины диэлектрика для различных значений проницаемости слоя диэлектрика;  $d = 6a^*$ ,  $z_0 = 8a^*$ ,  $\epsilon_1 = 11,4$ ,  $\epsilon_3 = 1$

В работе [19] было показано, что при нулевой толщине диэлектрика передислокация волновой функции основного состояния зависит только от разности потенциалов между донором и затвором и не зависит от положения донора. Аналогичная зависимость будет иметь место и при ненулевой толщине диэлектрика. Введем величину  $\Delta\Phi$  – разность потенциалов между донором и поверхностью полупроводника:

$$\Delta\Phi = \Phi(0, z_0) - \Phi(0, 0),$$

где

$$\Phi(\rho, z) = \hat{V}_G(\rho, z) + \hat{V}_D(\rho, z) + \hat{V}_{sim}(\rho, z).$$

Если ввести величину  $\Delta\Phi_C$  – критическую разность потенциалов, то расчеты показывают, что значение  $\Delta\Phi_C$  практически не зависит от толщины и материала диэлектрика (см. рис. 5). Это позволяет при моделировании структур с произвольной толщиной изолирующего слоя использовать результаты вычислений критической разности потенциалов, полученные в [19] при нулевой толщине диэлектрика.

**Заключение.** В работе проведено численное моделирование электронной структуры металл-диэлектрик-полупроводник в присутствии приповерхностного донора. Для расчета потенциала затвора и решения задачи для уравнения Шредингера была построена разностная схема. Был предложен способ аппроксимации краевых условий на границе расчетной области при вычислении потенциала затвора. Установлено, что использование предложенных граничных условий позволяет существенно уменьшить погрешность вычисления потенциала по сравнению с использованием нулевых граничных условий на границе расчетной области. На основании результатов расчетов также было установлено, что метод конечных разностей, как и метод конечных элементов, дает квадратичную погрешность решения уравнения Шредингера. При этом метод конечных разностей в отличие от метода конечных элементов позволяет получить оценку снизу для энергий.

С помощью описанного численного метода были получены зависимости основного, первого и второго возбужденных состояний донора в поле дискообразного затвора в трехслойной среде. На основании этих зависимостей был рассчитан критический потенциал затвора, при котором происходит передислокация электронной плотности основного состояния с донора в подзатворную область. Было установлено, что критическая разность потенциалов между донором и поверхностью полупроводника является определяющим параметром для описания функционирования устройства, так как практически не зависит от толщины и проницаемости диэлектрического слоя.

## Список использованных источников

1. Simulation of intrinsic parameter fluctuations in decanometer and nanometer-scale MOSFETs / A. Asenov [et al.] // IEEE transactions on electron devices. – 2003. – Vol. 50, no. 9. – P. 1837–1852.
2. Koenraad, P. M. Single dopants in semiconductors / P. M. Koenraad, M. E. Flatte // Nature materials. – 2011. – Vol. 10, no. 2. – P. 91–100.
3. Kane, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B. E. Kane // Nature (London). – 1998. – Vol. 393, no. 6681. – P. 133–137.
4. Electron-spin-resonance transistors for quantum computing in silicon-germanium heterostructures / R. Vrijen [et al.] // Physical Review A. – 2000. – Vol. 62, no. 1. – P. 012306-1–012306-10.
5. Charge-based quantum computing using single donors in semiconductors / L.C.L. Hollenberg [et al.] // Physical Review B. – 2004. – Vol. 69, no. 11. – P. 113301-1–113301-5.
6. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G. D. J. Smit [et al.] // Physical Review B. – 2003. – Vol. 68, no. 19. – P. 193302-1–193302-5.
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.] // Physical Review B. – 2003. – Vol. 68, no. 7. – P. 075317-1–075317-7.
8. MacMillen, D. B. Variational solutions of simple quantum systems subject to variable boundary conditions. II. Shallow donor impurities near semiconductor interfaces: Si, Ge / D. B. MacMillen, U. Landman // J. Chem. Phys. – 1984. – Vol. 80, no. 2. – P. 1691–1702.
9. Calderon, M. J. Quantum control of donor electrons at the Si-SiO<sub>2</sub> interface / M. J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Physical Review Lett. – 2006. – Vol. 96, no. 9. – P. 096802-1–096802-5.
10. 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 // Physical Review B. – 2007. – Vol. 75, no. 12. – P. 125311-1–125311-11.
11. Effect of a metallic gate on the energy levels of a shallow donor / A. F. Slachmuylders [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2008. – Vol. 92, no. 8. – P. 083104-1–083104-3.
12. Shallow donor states near a semiconductor-insulator-metal interface / Y. L. Hao [et al.] // Physical Review B. – 2009. – Vol. 80, no. 3. – P. 035329-1–035329-10.
13. Nikolyuk, V. A. The energy structure of quantum dots induced in quantum wells by a nonuniform electric field / V. A. Nikolyuk, I. V. Ignatiev // Semiconductors. – 2007. – Vol. 41, no. 12. – P. 1422–1429.
14. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
15. Souza, G. V. B. Finite-difference calculation of donor energy levels in a spherical quantum dot subject to a magnetic field / G. V. B. Souza, A. Bruno-Alfonso // Physica E. – 2015. – Vol. 66. – P. 128–132.
16. Modeling a nanowire superlattice using the finite difference method in cylindrical polar coordinates / C. Galeriu [et al.] // Comp. Phys. Commun. – 2004. – Vol. 157, no. 2. – P. 147–159.
17. Bingel, W. A. A physical interpretation of the cusp conditions for molecular wave functions / W. A. Bingel // Theoretica Chimica Acta. – 1967. – Vol. 8, no. 1. – P. 54–61.
18. Смайт, В. Электростатика и электродинамика / В. Смайт. – М.: Изд-во иностр. лит., 1954. – 604 с.
19. Levchuk, E. A. On controlling the electronic states of shallow donors using a finite-size metal gate / E. A. Levchuk, L.F. Makarenko // Semiconductors. – 2016. – Vol. 50, no. 1. – P. 89–96.
20. Сьярле, Ф. Метод конечных элементов для эллиптических задач / Ф. Сьярле. – М.: Мир, 1980. – 510 с.
21. Левчук, Е. А. Влияние магнитного поля на локализацию волновой функции электрона в системе нанозатвор – донор / Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко // Известия НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2016. – № 2. – P. 68–75.

## Информация об авторах

*Левчук Елена Александровна* – ассистент, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, Минск, Республика Беларусь). E-mail: liauchuk.alena@gmail.com

*Лемешевский Сергей Владимирович* – кандидат физико-математических наук, зам. директора, Институт математики НАН Беларуси (ул. Сурганова, 11, Минск, Республика Беларусь). E-mail: svl@im.bas-net.by

*Макаренко Леонид Федорович* – кандидат физико-математических наук, доцент, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, Минск, Республика Беларусь). E-mail: makarenko@bsu.by

## Information about the authors

*Elena A. Levchuk* – assistant, Belarusian state university (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Belarus). E-mail: liauchuk.alena@gmail.com

*Sergey V. Lemeshevskii* – Ph. D. (Physics and Mathematics), Deputy Director, Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus (11, Sarganova Ave., 220072, Minsk, Belarus). E-mail: svl@im.bas-net.by

*Leonid F. Makarenko* – Ph. D. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Belarus). E-mail: makarenko@bsu.by