

СОСТОЯНИЯ МЕЛКИХ ДОНОРОВ ВБЛИЗИ ГРАНИЦЫ МОП-СТРУКТУРЫ

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

Белорусский государственный университет,
220030, пр. Независимости 4, г. Минск, Республика Беларусь

Задача изучения энергетического спектра водородоподобного (кулоновского) центра вблизи границы раздела двух сред представляет интерес для решения нескольких физических проблем. Одной из них является изучение основных закономерностей физической адсорбции [1, 2]. Подобная задача возникает также при моделировании спектров отражения от полупроводников в области энергий экситонного поглощения [3, 4]. В последнее время интерес к этой задаче возник также в связи с предложением реализации квантового компьютера на основе доноров фосфора в кремнии, расположенных вблизи границы Si/SiO₂ [5].

Это предложение в последнее время привлекло большое внимание различных исследовательских групп, которые занимались различными аспектами реализации квантового компьютера на основе предложения Кейна. В рамках приближения эффективной массы были проведены расчеты состояний электрона, связанного с донором вблизи границы Si/SiO₂ [6] и Si/металл [7]. Применялся вариационный подход с упрощенной пробной функцией [6] и подход, основанный на методе конечных элементов [7]. Полученные результаты позволили получить достаточно полную информацию об электронных состояниях в двухслойных структурах. В то же время, предложение Кейна предполагает использование трехслойных структур металл/окисел/полупроводник. Поэтому представляет интерес исследование донорных состояний вблизи границы раздела именно таких структур, что и является целью настоящей работы.

В рамках метода эффективной массы уравнение Шредингера для огибающей функции $F(\vec{r})$ имеет вид

$$\hat{H}F(\vec{r}) = EF(\vec{r}), \quad (1)$$

Где гамильтониан \hat{H} включает в себя несколько слагаемых:

$$\hat{H} = \hat{T} + V_D + V_{D'} + V_{sim}. \quad (2)$$

Здесь V_D - энергия взаимодействия электрона с донором, $V_{D'}$ - электрона с изображением донора, V_{sim} - электрона со своим изображением. При определении оператора кинетической энергии будем предполагать, что эффективная масса является изотропной.

Для вычисления слагаемых V_D и $V_{D'}$ необходимо решить граничную задачу для уравнения Пуассона

$$\Delta\varphi_s = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_s}\delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad \text{при } z > 0, \quad (3)$$

$$\Delta\varphi_{ins} = 0, \quad \text{при } -d < z < 0, \quad (4)$$

$$\varphi_s|_{z=0} = \varphi_{ins}|_{z=0}, \quad \varepsilon_s \frac{\partial\varphi_s}{\partial z}\Big|_{z=0} = \varepsilon_{ins} \frac{\partial\varphi_{ins}}{\partial z}\Big|_{z=0}, \quad (5)$$

$$\varphi_s \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} 0, \quad \varphi_{ins}|_{z=-d} = 0. \quad (6)$$

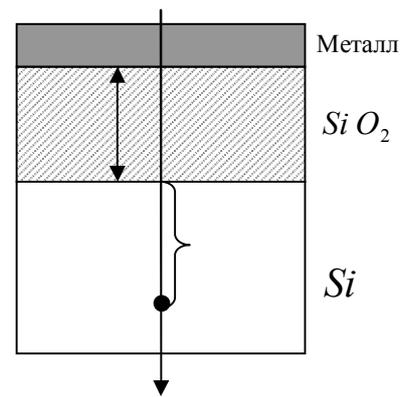


Рис. 1 Схема расположения мелкого донора D в структуре металл-окисел-полупроводник.

где \vec{r}_0 - радиус-вектор точки расположения донора, d - толщина окисла, φ_s, φ_{ins} - потенциал поля в полупроводнике и окисле, $\varepsilon_s, \varepsilon_{ins}$ - диэлектрическая проницаемость. Решение задачи (3)-(6), полученное с использованием преобразования Фурье-Бесселя, может быть записано как:

$$V_{D'} = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s} \left(\frac{Q^*}{\sqrt{(z+z_0)^2 + \rho^2}} - \frac{4\varepsilon_{ins}\varepsilon_s}{(\varepsilon_{ins} + \varepsilon_s)^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(Q^*)^{k-1}}{\sqrt{(z+z_0+2kd)^2 + \rho^2}} \right), \quad (7)$$

$$V_{sim} = \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s} \left(\frac{Q^*}{2z} - \frac{4\varepsilon_{ins}\varepsilon_s}{(\varepsilon_{ins} + \varepsilon_s)^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(Q^*)^{k-1}}{2z+2kd} \right), \quad (8)$$

где $Q^* = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{ins}}{\varepsilon_s + \varepsilon_{ins}}$.

Для нахождения решений уравнения Шредингера используется метод конечных элементов (МКЭ). Поскольку задача обладает цилиндрической симметрией, то будем использовать систему цилиндрических координат (ρ, z) . Расчетная область $(0, +\infty) \times (0, +\infty)$ с положением донора в точке $(0, z_0)$ аппроксимируется ограниченной областью $\Omega = (0, L) \times (0, z_0 + L)$ при $L = 10$. Волновая функция аппроксимируется линейными конечными элементами на треугольной сетке с количеством неизвестных ≈ 150000 . Обобщенная задача на собственные значения решается в пакете MATLAB с помощью функции pdeeig, реализующей метод Арнольди (Implicitly Restarted Arnoldi Method).

Результаты расчетов представлены на рисунках 2 и 3.

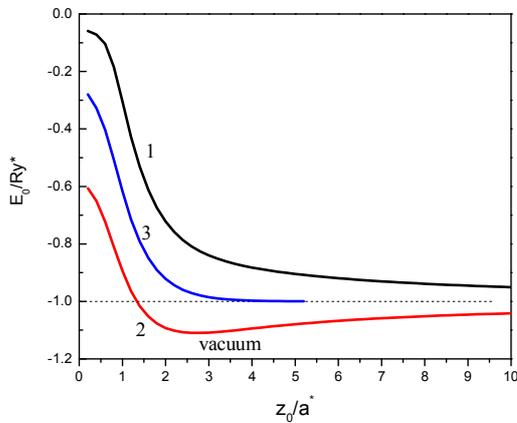


Рис.2. Зависимость энергии основного состояния электрона, связанного с донором, находящимся на расстоянии z_0 от границы раздела, для двухслойных структур:

- 1 – полупроводник/металл;
- 2 – полупроводник/изолятор;
- 3 – без учета потенциала изображения.

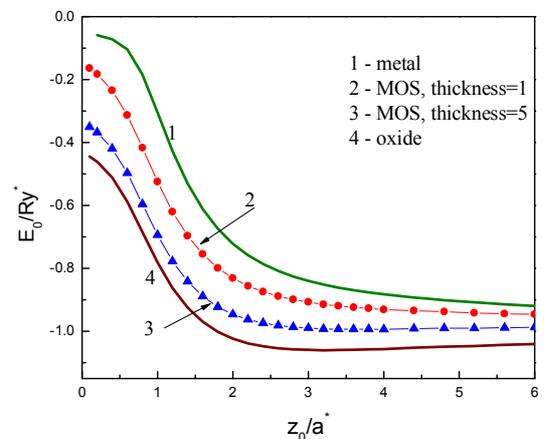


Рис.3. Зависимость энергии основного состояния электрона, связанного с донором, находящимся на расстоянии z_0 от границы раздела, для МОП-структур с различной толщиной окисла:

- 1 – $d=0$; 2 – $d=a^*$; 3 – $d=5a^*$; 4 – $d \rightarrow \infty$.

Как видно из рисунка 2, основным фактором, определяющим энергию основного состояния электрона вблизи границы полупроводника, является условие $F(\vec{r})=0$. Для структуры полупроводник/металл $Q^*=-1$, потенциал $V_{D'}$ является притягивающим, а

потенциал V_{sim} – отталкивающим. Энергия связи при малых z_0 становится значительно меньше энергии связи электрона с донором в объеме полупроводника. В случае расположения донора вблизи границы между полупроводником и вакуумом $Q^*=0.838$ и на зависимости $E_0(z_0)$ наблюдается минимум, появление которого важно для теории экситонов вблизи поверхности полупроводника [3, 4]. При $z_0 > 3$ учет потенциала изображения дает относительно небольшие поправки к $E_0 = -Ry^*$, которому соответствует энергия электрона в случае объемного расположения донора.

Как и ожидалось, результаты наших расчетов для двухслойных структур хорошо согласуются с результатами предыдущих исследований [8], где расчеты проводились вариационным методом Ритца. Разница в значениях энергии не превышает $10^{-4} Ry^*$ для случая структуры полупроводник/вакуум. В то же время расчеты, проведенные в работе [6] характеризуются значительно большей погрешностью, вследствие чего полученные там результаты носят скорее качественный характер.

В случае трехслойной среды (см. рисунок 3) с увеличением толщины слоя окисла энергия связи электрона постепенно увеличивается. При этом при $d \leq 5a^*$ происходит постепенное уменьшение вклада потенциала изображения в полную энергию связи.

Для полномасштабного исследования функционирования системы кубитов на основе фосфора кремния необходимо моделирование более сложных систем, состоящих из системы доноров вблизи поверхности МОП-структуры. Детальное моделирование такой системы с использованием метода конечных элементов потребует относительно больших машинных ресурсов. Для таких систем более предпочтительным является вариационный метод с использованием относительно простых функций, дающих, тем не менее, малую относительную погрешность в вычислении энергии (1-2 %). Поэтому второй задачей, которая решалась в настоящей работе, является использование результатов расчета методом конечных элементов для выбора оптимальной пробной функции. Оказалось, что для обеспечения требуемой точности можно использовать пробную функцию вида:

$$\psi_A = \alpha^3 (2L)^{3/2} \pi^{-1/2} e^{-\alpha L(\xi-\eta)} \eta(1+b\xi), \quad (9)$$

где ξ и η определяются стандартным образом в системе координат вытянутого сфероида с центрами в точках D и D' . Функция (9), по сути, дает значение энергии, зависящее только от одного подгоночного параметра α . Причем погрешность вычисляемых значений энергии меньше 1,4 % для двухслойных структур Si/SiO₂. Эта величина погрешности значительно меньше значения, полученного в работе [9] для двухпараметрической пробной функции.

Таким образом, в работе приведены результаты расчетов энергии основного состояния электрона, связанного с донором вблизи поверхности структуры металл/окисел/полупроводник. Предложена форма пробной функции, которая позволяет с хорошей точностью описать электронные состояния рассматриваемой системы.

[1] L. W. Bruch., Th. W. Ruijgrok. Surface Science, **79**, 509 (1979).

[2] D. B. MacMillen, U. Landman. J. Chem. Phys. **80**, 1691 (1984).

[3] A. D'Andrea, R. Del Sole. Phys. Rev. B **38**, 1197 (1988).

[4] S. Satpathy. Phys. Rev. B **28**, 4585 (1984).

[5] B. Kane. Nature **393**, 133 (1998).

[6] M. J. Calderón, B. Koiller, S. Das Sarma. Phys. Rev. B **75**, 125311 (2007).

[7] Slachmuylders et al. Appl. Phys. Lett. **92** 083104 (2008)

[8] D. B. MacMillen and U. Landman, Phys. Rev. B **29**, 4524 (1984).

[9] Y. L. Hao, A. P. Djotyan, A. A. Avetisyan, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **80**, 035329 (2009).