10;12

Квантовые эффекты при управлении электронными потоками

© Л.М. Баскин, В.Э. Грикуров, П. Нейттаанмяки,
Б.А. Пламеневский

С.-Петербургский государственный университет
E-mail: grikurov@math.nw.ru

Поступило в Редакцию 20 февраля 2004 г.

Исследуется влияние квантовых эффектов, возникающих при транспортировке электронного пучка в системе нанометровых размеров. Анализируется возможность управления таким потоком с помощью внешнего переменного электрического поля. Рассматривается двумерная управляющая система, состоящая из резонатора и конечного числа подсоединенных к нему волноводов. Разработан метод расчета матрицы рассеяния и волновой функции в таких структурах. Показано, что возможен выбор таких параметров электронного пучка и управляющего поля, при которых транспортировка пучка в заданный канал является практически достоверной.

Введение. Создание твердотельных и вакуумных структур микро- и наноразмеров позволяет разработать целый ряд принципиально новых устройств. К ним относятся, например, СВЧ устройства с непосредственной эмиссией электронов в поле волны [1], переключатели на основе квантовых нитей [2] и др.

В настоящей работе исследуется возможность управления электронным потоком в том случае, когда характерные размеры области изменения направления движения сравнимы с длиной волны электрона и определяющими являются квантовые эффекты. Отметим, что такие управляющие системы могут быть созданы как методами твердотельной электроники, так и с применением технологии вакуумной наноэлектроники.

Рассматривается двумерная модель „квантовой“ управляющей системы, состоящая из резонатора и трех подсоединенных к нему волноводов. По одному из волноводов к резонатору подводится электронный поток, два других являются отводящими. Стенки волноводов и резонатора представляют собой потенциальные барьеры. Вследствие малой энергии электронов эффектами вторичной эмиссии можно пренебречь [3]. На внешней границе резонатора находятся управляющие электроды с изменяемым потенциалом. Вследствие малости размеров системы (10–100 nm) ее емкости весьма малы, что обеспечивает высокое быстродействие. Такое устройство может быть использовано как ключ со сверхмалым временем переключения, как устройство усиления и генерации сигналов миллиметрового диапазона и т. д.

Описание модели. Пусть D — двумерная область, состоящая из резонатора (круга радиусом ρ_0) и присоединенных к нему трех каналов (волноводов), т. е. полубесконечных полос одинаковой ширины d; направления осей двух из каналов (назовем их 2 и 3-й) считаем симметричными относительно направления оси 1-го канала (рис. 1).

В одноэлектронном приближении (самосогласованным влиянием пространственного заряда электронов мы пренебрегаем) волновая функция частицы $\psi(x, y)$ подчиняется уравнению Шредингера

$$-\Delta\Psi + U(x, y)\Psi = E\Psi.^1 \qquad (1)$$

Предполагаем, что движение частицы ограничено областью D, и волновая функция $\Psi(x, y)$ обращается в нуль на ее границе.

Потенциал $U(x, y)$ в уравнении (1), управляющий электронным потоком, вводится в систему следующим образом. К стенкам резонатора A_1, A_2, A_3 подводятся постоянные потенциалы V_1, V_2, V_3 соответственно; управление осуществляется путем изменения значений $V_{1,2,3}$. Систему считаем экранированной тремя незамкнутыми линиями B_1, B_2, B_3, состоящими из сегментов радиуса B и лучей, уходящих на бесконечность вдоль стенок каналов (на рис. 1 экраны изображены жирным пунктиром). Тем самым, потенциал U является решением задачи Дирихле для уравнения Лапласа в бесконечной области D_B, ограниченной экранами $B_{1,2,3}$ (на которых краевые условия нулевые) и с данными $V_{1,2,3}$ на сегментах $A_{1,2,3}$. Известно [4], что такое решение экспоненциально убывает вдоль каналов. Поэтому в качестве приближения к U можно рассматривать (продолженное нулем вдоль каналов) решение задачи в конечной части области D_B, находящейся внутри круга достаточно большого радиуса, с нулевыми краевыми условиями на перекрывающих каналы дугах этого круга.

[1] Единицей измерения длины является ширина каналов d, а единицей измерения энергии — $\hbar^2/(2m^*d^2)$, m^* — эффективная масса электрона.

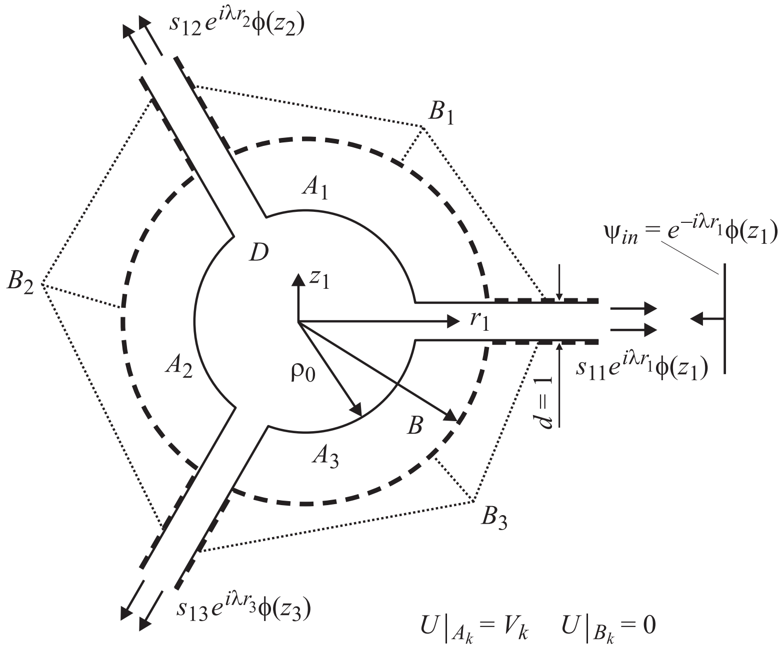

Рис. 1. К описанию модели.

Задачу рассеяния в области D будем рассматривать в диапазоне энергий $\pi^2 < E < (2\pi)^2$, поскольку: a) в выбранной системе единиц энергия E электрона, распространяющегося в каналах, должна превосходить π^2; б) при энергиях $E > (2\pi)^2$ число каналов рассеяния увеличивается, что усложняет интерпретацию получаемых результатов; c) анализируемый диапазон энергий при $d = (1 \div 10)$ nm соответствует характерным значениям $(0.01 \div 1)$ eV энергии частицы.

Пусть в систему вдоль первого канала инжектируется низкоинтенсивный пучок электронов, описываемый волновой функцией $\Psi_{in} = \phi(z_1)e^{-i\lambda r_1}$, где $\lambda = \sqrt{E - \pi^2}$, $\phi(z) = \cos(\pi z)/\sqrt{\lambda}$, (r_j, z_j), $j = 1, 2, 3$ — соответственно продольная и поперечная координаты в j-м канале (стенкам каналов соответствуют $z_j = \pm 1/2$). С точностью до слагаемых, экспоненциально убывающих при $r_j \to \infty$, рассеянное поле имеет вид

$$\Psi_{scatt} = \sum_{j=1}^{3} s_{1j} e^{i\lambda r_j} \phi(z_j), \quad \sum_{j=1}^{3} |s_{1j}|^2 = 1.^2 \tag{2}$$

Возникает вопрос: возможна ли такая комбинация энергии E и управляющих потенциалов V_1, V_2, V_3, при которой вероятность рассеяния будет сконцентрирована либо во 2-м, либо в 3-м канале (т. е. либо $|s_{12}|^2 \approx 1$, либо $|s_{13}|^2 \approx 1$)? В случае положительного ответа на этот вопрос переключение между каналами осуществляется путем перемены местами управляющих потенциалов V_1 и V_3.

Ниже изложен весьма общий и эффективный метод численного расчета коэффициентов рассеяния, при помощи которого мы приводим примеры положительного ответа на поставленный выше вопрос.

Метод расчета коэффициентов рассеяния. Итак, рассматривается решение уравнения (1), имеющее при $r_j \to \infty$ асимптотику вида

$$\Psi \sim \phi(z_1) e^{-i\lambda r_1} + \sum_{j=1}^{3} s_{1j} e^{i\lambda r_j} \phi(z_j). \tag{3}$$

Нас интересуют коэффициенты рассеяния s_{1j}. Основная идея их вычисления состоит в следующем.

Рассмотрим конечную область D_R, получающуюся из области D путем удаления из последней частей каналов, для которых $r_j > R$. Будем искать функцию ψ_R, которая удовлетворяет уравнению (1) в D_R и обращается в ноль на границе этой области, за исключением отрезков $r_j = R$, где предполагаются выполненными условия Неймана

$$\frac{\partial \Psi_R}{\partial r_j}\Big|_{r_j=R} = i\lambda\big(-\delta_{1j}\phi(z_1)e^{-i\lambda R} + c_j\phi(z_j)e^{i\lambda R}\big) \tag{4}$$

с некоторыми (пока произвольными) коэффициентами c_j. Если теперь определить числа c_j из условия

$$\sum_{j=1}^{3} \int_{-1/2}^{1/2} \Big|\Psi_R\big|_{r_j=R} - \big(\delta_{1j}\phi(z_1)e^{-i\lambda R} + c_j\phi(z_j)e^{i\lambda R}\big)\Big|^2 dz_j \mapsto \min, \tag{5}$$

[2] Используя запись рассеянного поля в форме (2), мы считаем, что каждое слагаемое отлично от нуля только в „своем“ канале.

то условия (4) и (5), вместе взятые, будут означать приблизительное выполнение соотношения (3), и можно надеяться, что при достаточно больших R числа c_j будут аппроксимировать искомые коэффициенты s_{1j}.

Действительно, можно показать, что

$$\sum_{j=1}^{3} |c_j - s_{1j}|^2 \underset{R\to\infty}{=} O(e^{-\gamma R}).$$

Доказательство этого результата в несколько иных (и более общих) ситуациях, а также оценку константы γ можно найти в [5–7].

Функционал в (5) является квадратичным относительно c_j. Вычисляя его коэффициенты при фиксированном R, находим точку минимума c_j этого функционала в виде $\mathbf{c} = A^{-1}\mathbf{b}$, где

$$A_{jk} = \sum_{p=1}^{3} \int\limits_{-1/2}^{1/2} \overline{\left(u_j^+|_{z_p=R} - \delta_{jp}\phi(z_p)e^{i\lambda R}\right)} \left(u_k^+|_{z_p=R} - \delta_{kp}\phi(z_p)e^{i\lambda R}\right) dz_p,$$

$$b_j = \sum_{p=1}^{3} \int\limits_{-1/2}^{1/2} \overline{\left(u_1^-|_{z_p=R} - \delta_{1p}\phi(z_p)e^{i\lambda R}\right)} \left(u_j^+|_{z_p=R} - \delta_{jp}\phi(z_p)e^{i\lambda R}\right) dz_p,$$

а функции $u_j^\pm(x, y)$ являются решениями уравнения (1) в D_R, удовлетворяющими условиям Дирихле на границе D_R всюду, за исключением отрезков $r_p = R$, $p = 1, 2, 3$, на которых $\partial u_j^\pm/\partial r_p|_{r_p=R} = \pm i\lambda\delta_{jp}\phi(z_p)e^{\pm i\lambda R}$. Тем самым задача о вычислении коэффициентов рассеяния сведена к решению частичных краевых задач на функции $u_j^\pm$, которые могут быть найдены любым подходящим численным методом. Ясно, что предлагаемый подход применим при любом числе каналов и не чувствителен к форме резонатора.

Результаты анализа. Продемонстрируем численные результаты, указывающие на существование таких комбинаций между энергией E падающего электрона и упаравляющими потенциалами $V_{1,2,3}$, при которых $|s_{12}|^2 \approx 1$.

При численной реализации вышеупомянутой схемы краевые задачи на функции $u_j^\pm(x, y)$ решались методом конечных элементов. Выбор

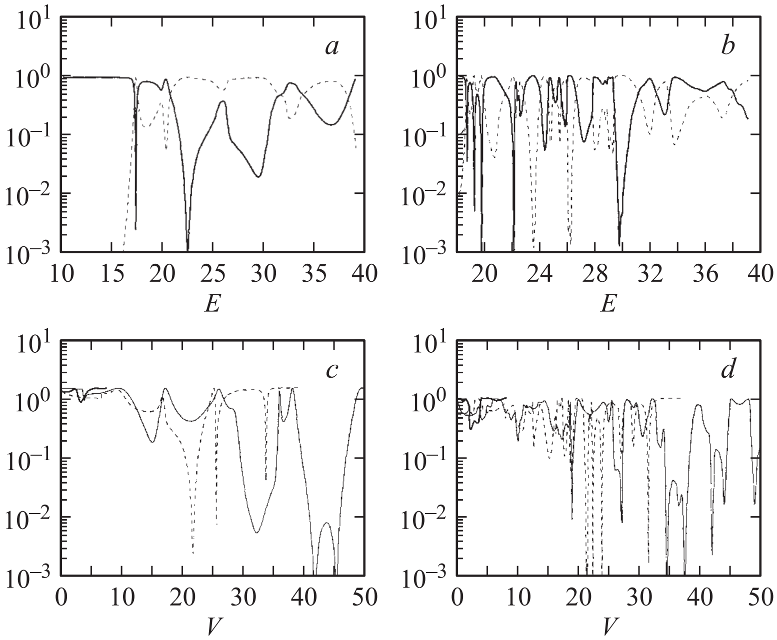

Рис. 2. *a*, *b* — коэффициенты рассеяния в зависимости от энергии E падающего электрона при управляющих потенциалах $V_1 = 0$, $V_2 = V_3 = (1.5\pi)^2 \sim 22.2$ (сплошной линией показаны потери $|s_{11}|^2 + |s_{13}|^2$, пунктирной линией — коэффициент прохождения $|s_{12}|^2$ для размеров резонатора $\rho_0 = 1.5$ (*a*) и $\rho_0 = 3$ (*b*)); *c*, *d* — потери $|s_{11}|^2 + |s_{13}|^2$ в зависимости от $V = V_2 = V_3$ при $V_1 = 0$ для энергий $E = (1.9\pi)^2$ (сплошная линия), $E = (1.5\pi)^2$ (пунктирная линия) и $E = (1.1\pi)^2$ (жирная сплошная линия, изображенная только для значений $V \lesssim 10$); размеры резонатора те же, что и на *a*, *b*. На нижней паре рисунков изображена интенсивность $|\psi(x, y)|^2$ волновой функции при управляющих потенциалах $V_1 = 0$, $V_2 = V_3 = (1.5\pi)^2 \sim 22.2$: слева — для резонатора радиусом $\rho_0 = 1.5$ при энергии $E \approx 17.26$ (отвечающей первой точке минимума потерь на рисунке *a*), справа — для резонатора радиусом $\rho_0 = 3$ при энергии $E \approx 22.09$ (отвечающей четвертой точке минимума потерь на рисунке *b*).

триангуляционной сетки осуществлялся таким образом, чтобы гарантировать абсолютную погрешность вычисления коэффициентов рассеяния не хуже 0.005. Тем самым вероятность суммарной интенсивности

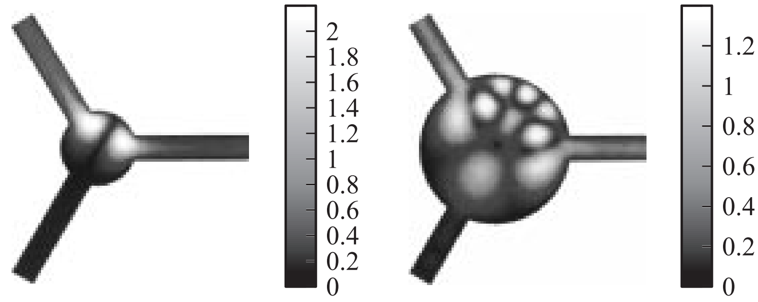

Рис. 2 (*продолжение*).

потерь в 1 и 3-й каналы, т. е. $|s_{11}|^2 + |s_{13}|^2$, можно считать надежно вычисленной, если она превосходит $(2 \div 5) \cdot 10^{-5}$.

В число параметров задачи помимо управляющих потенциалов $V_{1,2,3}$ и энергии E входят углы между направлениями каналов, размер ρ_0 резонатора и др. С целью минимизировать число параметров будем считать, что оси каналов образуют между собой равные углы (как на рис. 1) и зафиксируем $V_1 = 0$. Тестовые вычисления показали, что ввиду внесенной таким образом симметрии влияние разности $V_2 - V_3$ на результаты сравнительно невелико. Поэтому в дальнейшем полагаем $V_2 = V_3 = V$.

Некоторые результаты расчетов представлены на рис. 2. Легко видеть, что, варьируя один из параметров (E, V), можно уменьшить суммарную интенсивность потерь до величин менее 0.1%. Эффект малых потерь имеет место, если E и V являются сравнимыми величинами. Однако при достаточно малых энергиях электрона (см. жирные сплошные кривые на рис. 2, c, d) практически весь электронный поток отражается. Количество точек минимума потерь увеличивается вместе с радиусом ρ_0 резонатора — это видно из попарного сравнения рис. 2, a, b и c, d. При дальнейшем увеличении ρ_0 указанная тенденция усиливается.[3]

[3] Еще одним параметром задачи является экранирующий радиус B. Приведенные результаты получены при значении $B = 6.5$ этого параметра; при более близком экранировании эффект малых потерь несколько более ярко выражен.

Таким образом, изменяя потенциалы $V_{1,2,3}$, возможно осуществить такое управление электронным потоком, при котором он будет с вероятностью, близкой к единице, переключаться между двумя выходными волноводами. Проведенные численные эксперименты также показали, что управление возможно не только путем изменения этих потенциалов, но и полем внешней электромагнитной волны.

Список литературы

[1] *Brodie I., Spindt C.A.* // Applications of Surface Sci. 1979. V. 2. P. 149–163.
[2] *Sumetskii M.* // J. Phys. D: Condens. Matter. 1991. V. 3. P. 2651–2663.
[3] *Добрецов Л.Н., Гомоюнова М.В.* Эмиссионная электроника. М.: Наука, 1966. 564 с.
[4] *Nazarov S.A., Plamenevskii B.A.* Elliptic problems in domains with piecewise smooth boundaries. Berlin: Walter de Gruyter, 1994.
[5] *Грикуров В.Э., Нейттаанмяки П., Пламеневский Б.А., Хейккола Е.* // Докл. РАН. 2002. Т. 385. № 4. С. 465–469.
[6] *Grikurov V.E., Heikkola E., Neittaanmäki P., Plamenevskii B.A.* // Numerische Mathematik. 2003. V. 94. N 2. P. 269–288.
[7] *Kalvine V.O., Neittaanmäki P., Plamenevskii B.A.* // „WAVES 2003“ Proceed. of the Sixth Int. Conf. on Math. and Numer. Aspects of Wave Propagation. Springer, 2003. P. 469–474.