

01

©1994 г.

## МОДЕЛЬ ЩЕЛЕЙ НУЛЕВОЙ ШИРИНЫ И РЕЗОНАНСНЫЕ ЭФФЕКТЫ В КВАНТОВОМ ВОЛНОВОДЕ

*И.Ю.Попов, С.Л.Попова*

### Введение

Успехи в конструировании нанoeлектронных устройств в последнее время привели к возникновению значительного интереса к исследованию таких режимов прохождения электрона через различные структуры, в которых его волновая природа играет фундаментальную роль [1]. При исследовании многих нанoeлектронных структур оказывается, что изучение свойств электрона в них сводится по сути к решению классической задачи о распространении волны в волноводе [2]. При этом новый квантово-механический смысл (для данной нанoeлектронной структуры) приобретают известные эффекты из классической теории волн (отражение от открытого конца волновода [3], от изгиба волновода [2], вырождение мод при сужении волновода [4] и т. п.). При этом удается описать (и даже предсказать) ряд интересных явлений в нанoeлектронных устройствах, а также предположить возможные новые конструкции [5]. В настоящей работе мы исследуем двумерные нанoeлектронные структуры, анализ которых эквивалентен изучению следующих волновых систем. Первая система (рис. 1) состоит из резонатора, который соединен через малые отверстия с двумя полубесконечными волноводами; вторая — из волновода, к которому подсоединен через малое отверстие резонатор. Попытка найти коэффициент прохождения падающей волны через эти структуры наталкивается на сложную краевую задачу. Однако ясно, что в случае малых отверстий связи волновая динамика в такой сложной составной области есть в некотором смысле суперпозиция волновых динамик для составляющих ее частей. Строгий смысл указанному утверждению в случае резонатора Гельмгольца удается придать в рамках модели щелей нулевой ширины, основанной на теории самосопряженных расширений симметрических операторов [6–9]. Данный подход позволяет получить простую, а во многих случаях и явно решаемую модель изучаемого процесса, которая дает решение, близкое к решению реальной задачи. Указанный

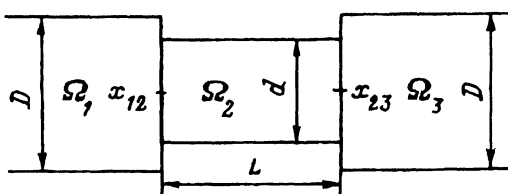


Рис. 1. Геометрия структуры волновод-резонатор-волновод.

метод является родственным с известным методом потенциалов нулевого радиуса в атомной физике [10–12]. В данной работе описанная идея реализована для системы, состоящей из резонаторов и волноводов.

В настоящей работе мы придерживаемся следующего плана действий. Сначала строится модель, затем находится решение модельной задачи рассеяния волны на неоднородности в волноводе, а следовательно, и коэффициент прохождения, по которому с помощью формул Ландауэра [13] определяется проводимость. По коэффициенту прохождения легко найти и ток, точнее, вольт-амперную характеристику данной наноэлектронной системы.

### Описание модели

Опишем используемую модель. Рассмотрим сначала структуру, показанную на рис. 1. Пусть  $\Omega_{1,3}$  — волноводы;  $\Omega_2$  — резонатор;  $x_{12}$ ,  $x_{23}$  — точки на границах. Рассмотрим оператор  $-\Delta = -(\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3)$ , где  $\Delta_{1,2,3}$  — операторы Лапласа с граничными условиями Неймана в  $\Omega_{1,2,3}$ . Ограничим этот оператор на множество гладких функций, обращающихся в нуль в точках  $x_{12}$ ,  $x_{23}$ . Замыкание  $\Delta_0$  полученного оператора есть симметричный оператор с индексами дефекта (4,4). Для построения его самосопряженного расширения, которое и будет давать модель, необходимо описать область определения сопряженного оператора  $\Delta_0$ . Это нетрудно сделать, принимая во внимание известную асимптотику функции Грина задачи Неймана в окрестности точки границы [14]. В результате элемент из области определения сопряженного оператора представим в виде

$$u(x) = \begin{cases} a_1 G_1(x, x_{12}, K_0) + u_1(x), & x \in \Omega_1, \\ a'_2 G_2(x, x_{12}, K_0) + a_2 G_2(x, x_{23}, K_0) + u_2(x), & x \in \Omega_2, \\ a_3 G_3(x, x_{23}, K_0) + u_3(x), & x \in \Omega_3, \end{cases} \quad (1)$$

где  $G_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) — функции Грина задач Неймана в областях  $\Omega_i$ ;  $K_0$  — некоторое мнимое число ( $K_0^2$  — регулярное значение спектрального параметра для оператора  $-\Delta_0$ ,  $u_i \in W_2^2(\Omega_i)$ ,  $W_2^2(\Omega_i)$  — пространства Соболева;  $a_i$  — некоторые числа).

Для выделения области определения самосопряженного расширения составляем граничную форму

$$J(u, v) = (-\Delta_0^* u, v) - (u, -\Delta_0^* v),$$

которая на элементах из области определения сопряженного оператора с помощью формулы Грина и с учетом асимптотик функций Грина в

окрестности точки границы и формулы (1) приводится к виду

$$J(u, v) = a_1^u \overline{v_1(x_{12})} - u_1(x_{12}) \overline{a_1^v} + a_2^u \overline{v_2'(x_{12})} - u_2'(x_{12}) \overline{a_2^{v'}} + \\ + a_2^u \overline{v_2'(x_{23})} - u_2'(x_{23}) \overline{a_2^v} + a_3^u \overline{v_3(x_{23})} - u_3(x_{23}) \overline{a_3^v},$$

где

$$u_2'(x_{23}) = u_2(x_{23}) + G_2(x_{23}, x_{12}, K_0),$$

$$u_2'(x_{12}) = u_2(x_{12}) + G_2(x_{12}, x_{23}, K_0).$$

Область определения самосопряженного расширения оператора  $-\Delta_0$  есть линеал элементов из области определения оператора  $-\Delta_0^*$ , на котором граничная форма  $J(u, v)$  аннулируется. Выделение такого линеала — это простая задача линейной алгебры, решение которой позволяет полностью описать все семейство самосопряженных расширений (процедура аналогична подобной для модели резонатора Гельмгольца [8]). Не будем здесь делать это, а выберем лишь наиболее естественное расширение, соответствующее условию “сохранения потока” через отверстия, которое выделяется условиями,

$$a_1 = -a_2', \quad a_3 = -a_2, \quad u_1(x_{12}) = u_2'(x_{12}), \quad u_2'(x_{23}) = u_3(x_{23}). \quad (2)$$

Замечание. Легко видеть, что элементы из области определения самосопряженного расширения имеют в окрестности точек  $x_{12}, x_{23}$  следующие асимптотики:

$$\phi(x) = a_i \ln r^{-1} + b_i + o(r), \quad r = |x - x_{12}|(|x - x_{23}|), \quad x \in \Omega,$$

где коэффициенты  $a_i, b_i$  связаны соотношениями

$$a_1 = -a_2', \quad a_3 = -a_2, \quad b_1 = b_2', \quad b_3 = b_2,$$

которые эквивалентны соотношениям (2). Т. е. выделение самосопряженного расширения означает согласование асимптотик решений по разные стороны отверстий.

В [6] показано, что в случае резонатора Гельмгольца можно выбрать параметр расширения  $K_0$  так, что модельное решение будет совпадать с главным членом асимптотики по ширине отверстия решения реальной задачи, в которой отверстие имеет малую ширину  $2\delta$ . При этом точность совпадения есть  $o(\delta^2 \ln \delta)$ . Соображения локальности позволяют надеяться, что указанный выбор обеспечит необходимое соответствие модельного и реального решений и в случае системы резонаторов и волноводов. Можно получить и большую точность, но для этого необходимо модифицировать модель, учитывая в ней высшие моменты [8], однако это не требуется в настоящей работе.

## Коэффициент прохождения и проводимость

Рассмотрим теперь задачу рассеяния волны, падающей из бесконечности по первому волноводу. Предположим сначала, что в волноводах есть только по одной распространяющейся моде. Падающая волна  $u(x, K)$  имеет вид

$$u(x, K) = \cos(\pi y D^{-1})(\exp(i\sqrt{K^2 - \pi^2 D^{-2}}(x - x_{12})) + \exp(-i\sqrt{K^2 - \pi^2 D^{-2}}(x - x_{12}))),$$

где  $K$  — волновое число ( $4\pi^2 D^{-2} > K^2 > \pi^2 D^{-2}$ ).

Ищем решение модельной задачи в виде

$$\psi(x, K) = \begin{cases} u(x, K) + \alpha_1 G_1(x, x_{12}, K), & x \in \Omega_1, \\ \alpha'_2 G_2(x, x_{12}, K) + \alpha_2 G_2(x, x_{23}, K), & x \in \Omega_2, \\ \alpha_3 G_3(x, x_{23}, K), & x \in \Omega_3. \end{cases} \quad (3)$$

Коэффициенты  $\alpha_j$  находим из условия выполнения (2). Легко видеть, что  $\alpha_j = a_j$ . Отсюда  $\alpha_1 = -\alpha'_2$ ,  $\alpha_2 = -\alpha_3$ . Чтобы удовлетворить оставшимся условиям из (2), примем во внимание, что функция  $(G_j(x, x_1, K) - G_j(x, x_1, K_0))$  не имеет сингулярности в точке  $x_1$ . Поэтому (2) приводит к следующей системе для определения коэффициентов:

$$u(x_{12}, K) + A\alpha_1 = -B\alpha_1 - C\alpha_3, \quad A\alpha_3 = -C\alpha_1 - B\alpha_3,$$

где

$$\begin{aligned} A &= (G_1(x, x_{12}, K) - G_1(x, x_{12}, K_0))|_{x=x_{12}} = \\ &= 2D^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (|\pi^2 D^{-2} n^2 - K^2|^{-1/2} - |\pi^2 D^{-2} n^2 - K_0^2|^{-1/2}), \\ B &= (G_2(x, x_{12}, K) - G_2(x, x_{12}, K_0))|_{x=x_{12}} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(K^2 - K_0^2) 4 |\psi_{nm}(x_{12})|^2}{Ld(\pi^2(m^2 d^{-2} + n^2 L^{-2}) - K^2)(\pi^2(m^2 d^{-2} + n^2 L^{-2}) - K_0^2)}, \end{aligned}$$

$$C = G_2(x_{12}, x_{23}, K) = 4L^{-1} d^{-1} \sum_{m,n=0}^{\infty} (-1)^n (\pi^2(d^{-2} m^2 + L^{-2} n^2) - K^2)^{-1}.$$

Обозначения см. на рис. 1. Здесь  $\psi_{nm}$  — собственная функция для резонатора  $\Omega'_2$ ,  $K_0$  — модельный параметр, выбирая который мы обеспечиваем хорошее соответствие решений модельной и реальной задач (см. выше). В [6] показано, что в случае резонатора Гельмгольца (см. сделанный выше комментарий) для этого параметр надлежит выбирать следующим образом:  $K_0 = i\delta^{-1} \exp(-\gamma)$ ,  $\gamma = -\Gamma'(1) = 0.5772\dots$  (постоянная Эйлера). Отсюда находим

$$\alpha_1 = u(x_{12}, K)(A + B)(C^2 - (A + B)^2)^{-1},$$

$$\alpha_3 = -u(x_{12}, K)C(C^2 - (A + B)^2)^{-1}.$$

Выделяя асимптотику полученных решений (3) при  $x \rightarrow \mp\infty$ , находим коэффициент отражения  $T$

$$T = \alpha_3^2(\alpha_1^2 + K^2 - \pi^2 D^{-2})^{-1}.$$

По коэффициенту отражения находим с помощью формулы Ландауэра [13] проводимость  $\rho$

$$\rho = T(1 - T)^{-1} e^2 (\pi \hbar)^{-1}. \quad (4)$$

Здесь  $e$  есть заряд электрона,  $\hbar$  — постоянная Планка. Мы предположили для простоты, что в волноводах есть только по одной распространяющейся моде, но аналогичный результат имеет место и в многомодовом случае. При этом необходимо использовать многоканальную формулу Ландауэра [15]

$$\rho = \frac{4e^2 \pi}{h} \frac{\left( \sum_{i,j=1}^n T_{ij} \right) \left( \sum_{i=1}^n v_i^{-1} \right)}{\sum_{i=1}^n \frac{1+R_i-T_i}{v_i}}, \quad (5)$$

где

$$T_i = \sum_{j=1}^n T_{ij}, R_i = \sum_{j=1}^n R_{ij},$$

$T_{ij}$  — вероятность для электрона, идущего направо в  $j$ -м канале, в левом волноводе ( $j$ -я мода) перейти в  $i$ -й канал в правом волноводе;  $R_{ij}$  — вероятность для этого электрона быть рассеянным назад в  $i$ -й канал в левом волноводе;  $v_i = \hbar m^{-1} K_i$ ;  $K_i$  — волновой вектор  $i$ -го состояния.

График полученной зависимости коэффициента прохождения  $T$  от толщины перемычки (ширины резонатора  $d$ , ее обычно изменяют с помощью использования МОП-структур, в которых толщина проводящего слоя зависит от прикладываемого управляющего напряжения) и от энергии падающего электрона  $K^2$  показан на рис. 2, 3. Указанные зависимости весьма примечательны. Графики имеют ярко выраженные узкие максимумы, появление которых связано с резонансным характером рассеяния в случае, когда энергия падающего электрона близка к собственной частоте резонатора. Здесь относительно малые изменения ширины резонатора (т.е. управляющего напряжения) приводят к значительным изменениям в коэффициенте прохождения, который достигает в максимумах значения 1 (проводимость стремится к бесконечности), а следовательно, и к большому изменению тока. Т.е. наблюдается эффект, аналогичный тому, что имеет место в транзисторе. В промежутках же между пиками коэффициент прохождения мал. Отметим, что форма резонатора (у нас он прямоугольный) не играет

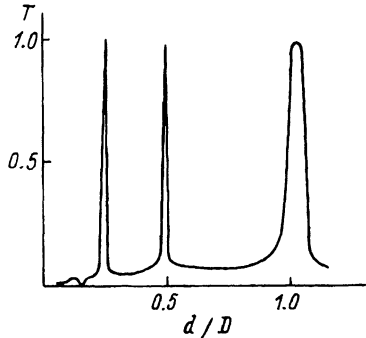


Рис. 2. Зависимость коэффициента прохождения от ширины резонатора в системе волновод-резонатор-волновод.

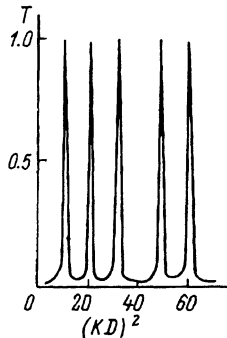


Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения от энергии электрона в системе волновод-резонатор-волновод.

существенной роли. Изменение формы приводит лишь к сдвигу собственных частот, а именно к смещению резонансных пиков.

По нашему мнению, полученный результат можно использовать при конструировании наноэлектронных устройств, в частности для создания транзистора, основанного на квантовом принципе. Легко найти и вольт-амперную характеристику такого прибора — зависимость тока ( $I$ ) в нашей системе от напряжения ( $U$ ), используя следующую формулу [1]:

$$I(U) = eh^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dE T(E) (f(E) - f(E + U)). \quad (6)$$

Здесь  $E = K^2$  — энергия электрона,  $f(E)$  — распределение Ферми-Дирака

$$f(E) = (\exp((E - \mu)/kT) + 1)^{-1},$$

$\mu$  — химический потенциал,  $k$  — постоянная Больцмана.

В многоканальном случае

$$T(E) = \sum_{n,m} T_{n,m}(E).$$

Полученная характеристика предлагаемого электронного устройства показана на рис. 4 (из нее видно, что предлагаемая система может быть использована и в других конструкциях, например в устройствах дискретизации и т.д.).

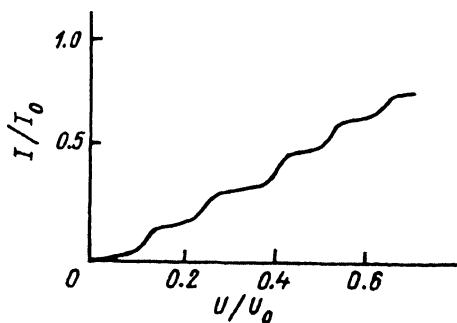


Рис. 4. Вольт-амперная характеристика системы волновод-резонатор-волновод. Используются безразмерные единицы.

Заметим, что если описанная выше структура является в некотором смысле фильтром электронов по энергиям (на выходе имеем фактически лишь электроны с определенным набором энергий, соответствующих резонансам), то можно предложить структуру с дополнительной в определенном смысле характеристикой. Речь идет о том, чтобы получить систему, являющуюся не "фильтром пропускания", а "фильтром поглощения", т.е. чтобы на выходе отсутствовали электроны с некоторыми энергиями. Этого можно добиться, используя *T*-образную структуру. Опишем соответствующую модельную задачу. Построение модели аналогично приведенному выше.

Пусть  $\Omega_1$  — волновод,  $\Omega_2$  — резонатор,  $x_0$  — общая точка их границ. Рассмотрим оператор  $-\Delta = -(\Delta_1 \oplus \Delta_2)$ , где  $\Delta_{1,2}$  — операторы Лапласа с граничными условиями Неймана в  $\Omega_{1,2}$ . Ограничим этот оператор на множество гладких функций, обращающихся в нуль в точке  $x_0$ . Замыкание  $\Delta_0$  этого ограничения есть симметричный оператор с индексами дефекта (2,2). Дефектные элементы, соответствующие некоторой регулярной точке  $K_0^2$ , есть функции Грина  $G_i(x, x_0, K)$  операторов  $\Delta_i$ . Оператор  $\Delta_0$  имеет самосопряженные расширения. Мы, как и ранее, не будем рассматривать все возможные расширения, а возьмем лишь то, которое отвечает условию "сохранения потока" через отверстие. Для определения коэффициента прохождения рассмотрим падающую волну (опять будем иметь дело с одномодовым случаем)  $u(x, K)$

$$u(x, K) = \cos(\pi y D^{-1}) \exp(i\sqrt{K^2 - \pi^2 D^{-2}} x).$$

Здесь  $K$  — волновое число ( $4\pi^2 D^{-2} > K^2 > \pi^2 D^{-2}$ ). Ищем решение модельной задачи в виде

$$\psi(x, K) = \begin{cases} u(x, K) + \alpha_1 G_1(x, x_0, K), & x \in \Omega_1, \\ -\alpha_1 G_2(x, x_0, K), & x \in \Omega_2. \end{cases} \quad (7)$$

Коэффициент  $\alpha_1$  легко находим из удовлетворения условиям согласования асимптотик

$$\alpha_1 = -u(x_0, K)(A_1 + B_1)^{-1},$$

где

$$\begin{aligned} A_1 &= (G_1(x, x_0, K) - G_1(x, x_0, K_0))|_{x=x_0} = \\ &= D^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (|\pi^2 D^{-2} n^2 - K^2|^{-1/2} - |\pi^2 D^{-2} n^2 - K_0^2|^{-1/2}), \\ B_1 &= (G_2(x, x_0, K) - G_2(x, x_0, K_0))|_{x=x_0} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(K^2 - K_0^2) 4 |\psi_{nm}(x_0)|^2}{Ld(\pi^2(m^2 d^{-2} + n^2 L^{-2}) - K^2)(\pi^2(m^2 d^{-2} + n^2 L^{-2}) - K_0^2)}. \end{aligned}$$

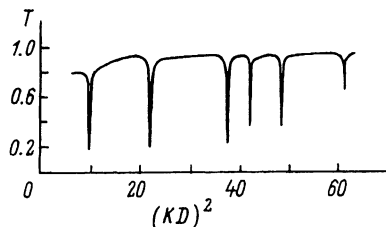
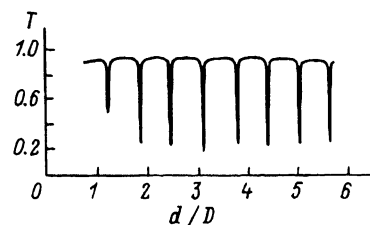


Рис. 5. Зависимость коэффициента прохождения электрона от ширины подсоединенного резонатора в T-образной структуре.

Рис. 6. Зависимость коэффициента прохождения от энергии электрона в T-образной структуре.

Здесь  $\psi_{nm}(x)$  — собственные функции для резонатора  $\Omega_2$ ,  $K_0$  — модельный параметр (его выбираем для обеспечения соответствия с “реальной” задачей). Коэффициент прохождения находится с помощью выделения асимптотики решения (7) при  $x \rightarrow \mp\infty$

$$T = (1 + \alpha_1(A + B))^{-1}(\pi^2 D^{-2} - K^2)^{-1/2}{}^2.$$

Проводимость определяется, как и ранее, по формуле (4). Переход к многоканальному случаю осуществляется так же, как было описано выше. Графики полученных в результате вычислений зависимостей коэффициента прохождения от ширины резонатора ( $d$ ) и от энергии электрона ( $E = K^2$ ) показаны на рис. 5 (при  $KD = 5$ ), 6 (при  $d = 2$ ,  $KD = 10000$ ). Как и было указано в начале этого раздела, система играет роль “фильтра поглощения”, т.е. на выходе отсутствуют электроны с энергиями, соответствующими резонансам ( $T = 0$ ). Вне резонансов коэффициент прохождения близок к 1. Зависимость  $T$  от  $d$  также характеризуется наличием острых пиков при некоторых значениях  $d$ , соответствующих резонансам. Отметим, что коэффициент прохождения оказывается чрезвычайно чувствительным к ширине волновода  $D$ , длине и ширине резонатора  $L$ ,  $d$ , а также к дебройлеровской длине волны электрона. Коэффициенты отражения и прохождения, разумеется, инвариантны относительно масштабного преобразования этих четырех длин. Поэтому без потери общности мы фиксируем ширину волновода и меняем лишь  $L$ ,  $d$ ,  $k$ . Ширина пиков зависит от параметров расширения  $K_0$ , который связан с шириной отверстия  $\delta$  в соответствующей реальной задаче. Если  $K_0$  увеличивается ( $\delta$  уменьшается), то пики становятся более узкими. Это замечание относится и к структуре, описанной в предыдущем разделе. Зависимость коэффициента прохождения  $T$  от положения отверстия ( $x_0$ ) слаба вдали от резонансов и сильна вблизи резонансных значений  $k$ .

Ширину резонатора, как и в описанной ранее конструкции, можно изменять за счет варьирования управляющего напряжения при использовании МОП-структур. Высокая чувствительность коэффициента прохождения к малому изменению управляющего напряжения в определенном диапазоне изменения других параметров также аналогична действию транзистора. Поэтому можно надеяться, что и эту конструкцию можно использовать для создания нанoeлектронного аналога транзистора, основанного на квантовых принципах. Требуемые линейные размеры наших систем связаны с длиной свободного пробега электрона и, следовательно, зависят от температуры. Они имеют



порядок  $10^3$  для температур, меньших 4.2 К, и  $10^2$  для комнатной температуры. Вольт-амперная характеристика для последней системы легко находится (как и ранее) по формуле (6). Отметим, что похожее устройство  $T$ -образной структуры предложено в [5].

Можно создать и некую комбинацию описанных двух структур, когда к промежуточному резонатору сбоку подсоединен еще один резонатор. Эта схема эквивалентна первой структуре. Из-за подсоединения дополнительного резонатора происходит лишь сдвиг собственных частот. Поэтому новых эффектов здесь нет, однако данная схема может оказаться полезной в практических вопросах, поскольку здесь может оказаться более удобным осуществлять подстройку частоты резонатора, т.е. подстройку резонансных пиков.

Авторы благодарят Б.С. Павлова, П. Экснера, П. Шебу, Ю.В. Гуделя, В.А. Гейлера за интересные обсуждения.

### Список литературы

- [1] *Sols F.* // Ann. Phys. 1992. Vol. 214. N 2 P. 386.
- [2] *Exner P., Seba P., Stovicek P.* // Lect. Notes Phys. 1989. Vol. 324. P. 257.
- [3] *Kriman A.M., Ruden P.P.* // Phys. Rev. B. 1985. Vol. 32. N 12. P. 8013.
- [4] *Van Wees B.J., van Houten H., Beenakker C.W. J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 60. N 9. P. 848.
- [5] *Sols F., Macucci M., Ravaioli U., Hess K.* // Appl. Phys. Lett. 1989. Vol. 54. N 4. P. 350.
- [6] *Popov I. Yu.* // Lect. Notes. Phys. 1989. Vol. 324. P. 218.
- [7] *Popov I. Yu.* // J. Math. Phys. 1992. Vol. 33. N 11. P. 3794.
- [8] *Кисилев А.А., Попов И.Ю.* // ТМФ. 1991. Т. 89. № 1. С. 491.
- [9] *Popov I. Yu.* // J. Math. Phys. 1992. Vol. 33. N 5. P. 1685.
- [10] *Albeverio S., Gestezy F., Hoegh-Kron R., Holden H.* Solvable Models in Quantum Mechanics. Berlin: Springer Verlag, 1988.
- [11] *Павлов Б.С.* // УМН. 1987. Т. 42. № 6. С. 99.
- [12] *Демков Ю.Н., Островский В.Н.* Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975. 240 с.
- [13] *Landauer R.* // Phys. Lett. A. 1981. Vol. 85. P. 91.
- [14] *Павлов Б.С., Фадеев М.Д.* // Записки научн. семинаров ЛОМИ АН СССР. 1983. Т. 126. С. 159.
- [15] *Sivan U., Imry Y.* // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 33. N 1. P. 551.

С.-Петербургский институт  
точной механики и оптики

Поступило в Редакцию  
18 декабря 1992 г.  
В окончательной редакции  
28 октября 1993 г.