

Университет ИТМО

Факультет информационных технологий и программирования
Кафедра компьютерных технологий

Герасимов Дмитрий Александрович

Метод R-матриц и резонансные эффекты в квантовых волноводах

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук,
профессор кафедры ВМ И. Ю. Попов

Санкт-Петербург
2014

Содержание

Введение	5
Глава 1. Обзор предметной области	8
1.1 Аксиоматизация квантовой механики	8
1.2 Уравнение Шредингера	8
1.3 Ток вероятности	9
1.4 Коэффициент прохождения	9
1.5 Фиксирование нотации	10
1.5.1 Различные обозначения	10
1.5.2 Атомная система единиц	10
1.5.3 Функция Грина	11
1.5.4 Скалярное произведение	11
1.6 Самосопряженные расширения симметрических операторов	12
1.7 Обобщения гильбертовых пространств	13
1.7.1 Пространства с индефинитным скалярным произведе- нием	14
1.7.2 Пространство Крейна	14
1.7.3 Пространство Понтрягина	15
1.8 Обобщенные точечные взаимодействия	16
1.8.1 Шкалы гильбертовых пространств	16
1.8.1.1 Положительная шкала	17
1.8.1.2 Отрицательная шкала	17
1.8.2 Предпонтрягинское пространство \mathcal{P}	17
1.8.3 Понтрягинское пространство Π	18
1.9 Терминология теории рассеяния	20
Глава 2. Описание реализованного подхода	21
2.1 Модель двумерного волновода с прямоугольным резонатором	21
2.2 Собственные состояния, энергии и функции Грина областей задачи	22
2.2.1 Одномерная яма с бесконечными стенками	22
2.2.2 Одномерная свободная частица	22

2.2.3	Двумерная яма с бесконечными стенками	23
2.2.4	Бесконечная квазиодномерная полоса с бесконечными стенками	24
2.3	Асимптотика производной функции Грина в окрестности отверстия	25
2.4	Построение модели с отверстием нулевой ширины	27
2.4.1	Расчет понтрягинского пространства для резонатора	28
2.4.1.1	Расчет дефектного элемента	28
2.4.1.2	Построение предпонтрягинского пространства	29
2.4.1.3	Переход в понтрягинское пространство	31
2.4.2	Расчет понтрягинского пространства для волновода	33
2.4.2.1	Расчет дефектного элемента	33
2.4.2.2	Построение предпонтрягинского пространства	34
2.4.2.3	Переход в понтрягинское пространство	35
2.5	Расширение модели в понтрягинском пространстве	35
2.5.1	Фиксация расширения и получение явной формы волновой функции	35
2.5.2	Расчет коэффициента прохождения	36
Глава 3.	Результаты	40
3.1	Зависимость коэффициента прохождения от энергии входящей волны при фиксированной геометрии резонатора	40
3.2	Плотности вероятности	41
3.3	Зависимость коэффициента прохождения от геометрии резонатора	42
Заключение	44	
Список литературы	45	

Введение

В микроэлектронике для изготовления интегральных схем в основном используются полевые транзисторы. Полевой транзистор — прибор, в простейшем случае состоящий из трех контактов:

- исток — контакт, на который подаются носители заряда;
- сток — контакт, с которого уходят носители заряда;
- затвор — контакт, напряжением на котором можно регулировать ток, идущий от истока к стоку.

Фактически, транзистор является «управляемым сопротивлением», то есть прибором, проводимость которого можно контролировать напряжением на затворе, что и позволяет использовать его для реализации логических элементов.

Возникает естественная необходимость в уменьшении размеров транзисторов, так как чем меньше транзистор, тем:

- выше производительность:
 - скорость распространения сигнала в проводнике конечна, и чем ближе расположены транзисторы друг к другу в интегральной схеме, тем быстрее сигнал проходит через эту схему;
 - транзистор быстрее реагирует на изменение тока затвора, и быстрее переключает свое состояние проводимости.
- меньше тепловыделение, так как затвор работает на меньшем напряжении;
- более эффективно используется полупроводниковая заготовка:
 - можно более плотно упаковать транзисторы;
 - можно напечатать больше транзисторов за один прогон станка.

Уже около 50 лет в микроэлектронике действительно наблюдает-

ся экспоненциальный рост количества транзисторов на единицу площади, которую называют законом Мура. В настоящее время Intel изготавливает транзисторы размером 22 нм [1], в 2014 ожидается 14 нм [2]. Однако, на размерах около 10 нм становятся заметными квантомеханические эффекты, что может приводить к трудностям в проектировании транзисторов. В частности, рассмотрим проблему тока утечки через затвор, возникающего за счет квантового туннелирования.

Когда на затвор транзистора не подается напряжение, через транзистор не должен идти ток. В полупроводниковых транзисторах это достигается за счет того, что в отсутствие напряжения затвора присутствует потенциальный барьер. Вообще говоря, всегда есть ненулевая вероятность туннелирования электронов через потенциальный барьер (и, соответственно, ненулевой ток утечки), которая в простейшем приближении зависит от:

- ширины потенциального барьера;
- высоты потенциального барьера;
- эффективной массы переносчиков заряда.

Соответственно, уменьшать вероятность туннелирования можно следующим образом:

- увеличить ширину потенциального барьера, но это непосредственно противоречит уменьшению размера транзистора;
- увеличить высоту потенциального барьера, но это влечет за собой увеличение напряжения затвора и потери тепла;
- увеличить эффективную массу носителей заряда, но это влечет за собой уменьшение подвижности носителей заряда и, соответственно, скорости переключения состояния транзистора.

В связи с данной проблемой происходит поиск альтернативных способов реализации транзисторов (то есть, приборов с «управляемым сопротивлением»). В данной работе будет предложена модель транзистора, использующая резонансные квантовомеханические эффекты для реализации

нелинейности в проводимости. Она представляет из себя квантовый волновод с резонатором, геометрию которого можно контролировать, например, внешним электрическим полем. Физически такие резонаторы могут быть реализованы на основе квантовых точек (англ. quantum dots), для которых в настоящее время существуют технологии, позволяющие сделать их размер в 2-10 нм. Изменение геометрии резонатора влечет за собой изменение коэффициента проводимости, и, соответственно, проводимости транзистора.

К сожалению, исследовать аналитически квантомеханические системы очень сложно, к примеру, уже в простейшей модели одномерной прямоугольной квантовой ямы (англ. 1D finite potential well) для расчета собственных энергий и функций, необходимых для расчета коэффициента проводимости, нужно решать трансцендентные уравнения. Естественно, в двумерном и трехмерном случаях, уравнения решать тем более сложнее.

В рамках решения этой проблемы разработан подход, позволяющий изменить исходную модель, получив ее аппроксимацию, которая допускает аналитическое решение. В работах [3–5] этот подход был применен для граничного условия Неймана. Однако, физически обоснованным граничным условием является граничное условие Дирихле, которое еще не было исследовано в рамках этого подхода.

Целью данной работы является исследование квантового волновода с граничным условием Дирихле, аналитического решения уравнения Шредингера для этого волновода методом аппроксимации моделью нулевого радиуса и расчет его спектральных характеристик.

Глава 1. Обзор предметной области

1.1. АКСИОМАТИЗАЦИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

- с каждой физической системой ассоциировано сепарабельное гильбертово пространство \mathcal{H} над полем комплексных чисел \mathbb{C} со скалярным произведением $\langle \cdot | \cdot \rangle$. Состояния квантовой системы ассоциированы с элементами \mathcal{H} , имеющими единичную норму;
- каждая *наблюдаемая* физическая величина a (координата, импульс, спин, энергия, и т.д.) ассоциирована с самосопряженным оператором A (возможно, неограниченным), плотно определенным в пространстве \mathcal{H} . Множество возможных значений наблюдаемой — её спектр $\sigma(A)$, который для самосопряженного оператора вещественен и состоит из дискретной и непрерывной части;
- при получении в результате измерения наблюдаемой некоторого ее собственного значения, состояние системы проецируется на собственное состояние, соответствующее этому собственному значению;
- временная эволюция системы задается однопараметрической сильно непрерывной унитарной группой $U(t)$, генератором которой является гамильтониан H , оператор полной энергии системы, то есть выполняется $\Psi(t) = U(t)\Psi_0 = e^{-iH\frac{t}{\hbar}}\Psi_0$.

1.2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера описывает временную эволюцию чистых состояний нерелятивистских квантовых систем во времени. Фактически, оно эквивалентно определению генератора группы $U(t)$, и имеет форму:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H\Psi(t)$$

, где i — мнимая единица, \hbar — приведенная постоянная Планка, H — гамильтониан, оператор полной энергии системы, спектр которого представляет собой множество возможных значений энергии системы, которые можно получить при ее измерении.

Для каждой квантовой системы гамильтониан свой, и его форму надо «угадывать» из классических аналогий и по физическим экспериментам. В данной работе понадобится выражение для гамильтониана нерелятивистской частицы в потенциальном поле:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)$$

, где μ — эффективная масса частицы.

1.3. ТОК ВЕРОЯТНОСТИ

Ток вероятности (англ. probability current) — величина, описывающая «течение» волновой функции через единицу поверхности за единицу времени. Для частицы в потенциальном поле ток вероятности выражается как:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi}(\overline{\psi(\mathbf{r}, t)}\nabla\psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t)\nabla\overline{\psi(\mathbf{r}, t)})$$

1.4. КОЭФФИЦИЕНТ ПРОХОЖДЕНИЯ

Интуитивно, коэффициент прохождения — отношение «количества» волны, прошедшей через барьер к «количеству» волны, на этот барьер падающий. «Количество» волны должно быть связано с током вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, однако ток является векторной величиной, и функцией нескольких аргументов, тогда как хотелось бы получить характерное скалярное значение. Можно заметить, что:

- ток вероятности не зависит от времени для не изменяемой во времени конфигурации системы;
- если в системе можно выделить направление распространения волны,

по этому направлению идет основной поток, остальные либо зануляются из-за симметрии, либо ими можно пренебречь;

- если в системе можно выделить сечение, перпендикулярное направлению распространения волны, по нему можно проинтегрировать ток вероятности.

В результате этого получаем величины J_{inc} и J_{trans} , которые характеризуют входящий и прошедший потоки соответственно.

Коэффициент прохождения определяется как

$$T = \frac{|J_{trans}|}{|J_{inc}|}$$

1.5. ФИКСИРОВАНИЕ НОТАЦИИ

1.5.1. Различные обозначения

- Жирным обозначаются вектора: к примеру, $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^n$, без выделения жирным — их длины: $r = |\mathbf{r}|$;
- Сопряжение комплексных чисел обозначается как \bar{c} ;
- Сопряжение операторов обозначается как A^* .

1.5.2. Атомная система единиц

В данной работе все расчеты ведутся в атомной системе единиц Хартри (англ. Hartree atomic units, далее АСЕ). В ней нормализуются следующие константы:

Величина	Значение в АСЕ	Значение в СИ
Действие	1 приведенная постоянная Планка	$\approx 1.05 \times 10^{-34}$ Дж·с
Масса	1 масса электрона	$\approx 9.1 \times 10^{-31}$ кг
Заряд	1 заряд электрона	$\approx 1.6 \times 10^{-19}$ Кл

Производными единицами, необходимыми нам, будут:

Величина	Значение в АСЕ	Значение в СИ
Длина	1 боровский радиус	$\approx 5.29 \times 10^{-11}$ м
Энергия	1 хартри	$\approx 4.3 \times 10^{-18}$ Дж

Далее, если не будет оговорено иное, все квантомеханические уравнения и вычисления будут приведены в АСЕ.

1.5.3. Функция Грина

Термин «функция Грина» используется в двух значениях:

- как интегральное ядро резольвентного оператора: $G(\mathbf{x}, \mathbf{s}; \lambda)$ — ядро оператора $R(\lambda) = \frac{1}{\lambda I - L}$;
- как решение дифференциального уравнения $L_x G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\delta(\mathbf{x} - \mathbf{s})$, где δ — многомерная дельта-функция Дирака.

Также в физике и математике сложилась небольшая неоднозначность в определении функции Грина:

- в физике: $L_x G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\delta(\mathbf{x} - \mathbf{s})$;
- в математике: $L_x G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{s})$.

Мы будем использовать **физическую** нотацию в данной работе. В частности, это означает, что спектральное представление функции Грина выглядит как:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = - \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{s})}{\lambda_n}$$

1.5.4. Скалярное произведение

В определении скалярного произведения в комплексном векторном пространстве V существует следующая неоднозначность:

- В физике: **анти**линейно по *первому* аргументу, линейно по *второму*:

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in V : \forall a, b \in \mathbb{C} : \langle a\mathbf{x} + b\mathbf{y} | \mathbf{z} \rangle = \bar{a} \langle \mathbf{x} | \mathbf{z} \rangle + \bar{b} \langle \mathbf{y} | \mathbf{z} \rangle$$

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in V : \forall a, b \in \mathbb{C} : \langle \mathbf{x} | a\mathbf{y} + b\mathbf{z} \rangle = a \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle + b \langle \mathbf{x} | \mathbf{z} \rangle$$

- В математике: линейно по *первому* аргументу, **анти**линейно по *второму*:

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in V : \forall a, b \in \mathbb{C} : \langle a\mathbf{x} + b\mathbf{y} | \mathbf{z} \rangle = a \langle \mathbf{x} | \mathbf{z} \rangle + b \langle \mathbf{y} | \mathbf{z} \rangle$$

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in V : \forall a, b \in \mathbb{C} : \langle \mathbf{x} | a\mathbf{y} + b\mathbf{z} \rangle = \bar{a} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle + \bar{b} \langle \mathbf{x} | \mathbf{z} \rangle$$

В данной работе используется **физическая** нотация. В частности, это означает, что скалярное произведение в $L^2(E)$ определено как $\langle f | g \rangle = \int_E \overline{f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$.

1.6. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ РАСШИРЕНИЯ СИММЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ

В квантовой механике все операторы, соответствующие наблюдаемым, в частности, гамильтониан, который задает динамику квантовой системы, должны быть самосопряженными. Часто бывает так, что оператор задается некоторым формальным выражением на некотором домене из каких-то физических соображений, но он оказывается симметрическим, а не самосопряженным. Такой оператор не может задавать динамику системы, так как не всегда является генератором однопараметрической сильно непрерывной унитарной группы.

Известно соотношение: $\text{dom } A \subseteq \text{dom } A^*$. Из него можно понять, что если дополнить домен оператора какими-либо функциями, домен сопряженного оператора при этом будет сужаться. Можно провести эту процедуру так, чтобы в итоге домены исходного и сопряженного оператора совпали. Однако расширение оператора до самосопряженного происходит не всегда однозначно.

Пусть A — замкнутый симметрический оператор. Тогда определим:

$$K_+ = \ker(A^* + i)$$

$$k_+ = \dim K_+$$

$$K_- = \ker(A^* - i)$$

$$k_- = \dim K_-$$

K_+, K_- называются дефектными подпространствами оператора A , k_+, k_- — его индексами дефекта.

Известна теорема фон Неймана, которая более точно описывает соотношение $\operatorname{dom} A \subseteq \operatorname{dom} A^*$: если A — замкнутый симметрический оператор, то $\operatorname{dom} A^* = \operatorname{dom} A \oplus K_+ \oplus K_-$.

Из этой теоремы сразу видно, что индексы дефекта нулевые тогда и только тогда, когда оператор самосопряжен ($\operatorname{dom} A^* = \operatorname{dom} A$). Более общим утверждением является следующее: симметрический замкнутый оператор A имеет самосопряженные расширения тогда и только тогда, когда его индексы дефекта равны: $k_+ = k_- = k$. При этом все его самосопряженные расширения параметризуются унитарными матрицами размера $k \times k$ (которые однозначно определяются k^2 вещественными параметрами). Выбор конкретного расширения должен быть осуществлен уже с учетом желаемых свойств соответствующей оператору физической величины.

1.7. ОБОБЩЕНИЯ ГИЛЬБЕРТОВЫХ ПРОСТРАНСТВ

Напомним определение: гильбертово пространство — полное нормированное пространство, в котором норма порождается скалярным произведением: $\|\cdot\| = \sqrt{\langle \cdot | \cdot \rangle}$. В физике иногда приходится прибегать к обобщениям гильбертовых пространств. Рассмотрим некоторые из них.

1.7.1. Пространства с индефинитным скалярным произведением

Пара $(X, [\cdot, \cdot])$ называется пространством с индефинитным скалярным произведением (англ. indefinite inner product space), далее его будем называть просто индефинитным пространством, если $[\cdot, \cdot] : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ — эрмитова форма (англ. Hermitian form). От гильбертовых пространств оно отличается ослаблением требования положительной определенности скалярного произведения.

Элемент $x \in X$ называется:

- положительным если $[x, x] > 0$;
- отрицательным, если $[x, x] < 0$;
- нейтральным, если $[x, x] = 0$.

Линейное подпространство Y индефинитного пространства X называется положительным, отрицательным или нейтральным, если все его элементы положительны, отрицательны или нейтральны соответственно. В частности, любое гильбертово пространство полностью положительно.

На индефинитные пространства естественным образом обобщаются следующие понятия:

- прямой ортогональной разностью подпространств Z и Y называется множество $Z[-]Y = \{f \mid f \in Z, \forall g \in Y : [f, g] = 0\}$;
- ортогональным дополнением подпространства Y индефинитного пространства X называется подпространство $Y^{[\perp]} = \{f \mid f \in X, \forall g \in Y : [f, g] = 0\}$. Заметим, что $Y^{[\perp]} = X[-]Y$;
- изотропной частью подпространства Y называется подпространство $Y^0 = Y \cap Y^{[\perp]}$.

1.7.2. Пространство Крейна

Пространством Крейна (англ. Krein space) называется индефинитное пространство $(K, [\cdot, \cdot])$, представимое в виде прямой ортогональной сум-

мы $K = K^+[+]K^-$, где:

- K^+ — гильбертово пространство со скалярным произведением $\langle f|g \rangle_+ = [f, g]$. Проекцию $x \in K$ на K^+ будем обозначать как x_+ .
- K^- — гильбертово пространство со скалярным произведением $\langle f|g \rangle_- = -[f, g]$. Проекцию $x \in K$ на K^- будем обозначать как x_- .

Такое представление называется фундаментальным разложением. Фундаментальное разложение не единственно, но размерности K^+ и размерности K^- для различных фундаментальных разложений одинаковы. Для фундаментального разложения можно определить каноническое скалярное произведение на элементах K :

$$\langle x|y \rangle_K = [x_+, y_+] - [x_-, y_-]$$

, и породить этим скалярным произведением норму $\|\cdot\|_K$. Можно показать, что нормы для пространств Крейна, соответствующих разным фундаментальным разложениям, эквивалентны. Таким образом, определим сильную топологию в $(K, [\cdot, \cdot])$ как топологию в гильбертовом пространстве $(K, \langle \cdot | \cdot \rangle_K)$. Сходимость в данной топологии назовем сильной.

Более подробно о пространствах Крейна можно прочитать в пособии [6].

1.7.3. Пространство Понтрягина

Пространство Понтрягина (понтрягинское пространство, англ. Pontryagin space) — пространство Крейна $(\Pi, [\cdot, \cdot])$, в котором размерность Π^- конечна (иногда определяют, что размерность Π^+ конечна, между этими определениями нет принципиальной разницы), при этом $\dim \Pi^-$ называется индексом понтрягинского пространства. В этой терминологии, гильбертово пространство имеет индекс 0, пространство Минковского имеет индекс 1.

Предпонтрягинское пространство (англ. pre-Pontryagin space) — индефинитное пространство $(\mathcal{P}, [\cdot, \cdot]_{\mathcal{P}})$, такое что $[\cdot, \cdot]_{\mathcal{P}}$ — невырожденное, и

максимальное отрицательное подпространство \mathcal{P} имеет конечную размерность.

Для любого предпонтрягинского пространства \mathcal{P} с максимальным отрицательным подпространством размерности k существует его пополнение: понтрягинское пространство Π индекса k , такое что \mathcal{P} плотно в Π .

Подробнее о понтрягинских пространствах можно прочитать в пособии [7].

1.8. ОБОБЩЕННЫЕ ТОЧЕЧНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В физике часто бывает просто работать с сингулярными объектами (например, такими как дельта-функция Дирака), а после их анализа некоторым образом комбинировать решения сингулярных задач, чтобы получать решения исходных. К примеру, при решении стационарного уравнения Шредингера обычно рассматривают состояния рассеяния, которые являются только формальными решениями, так как не лежат в \mathcal{L}^2 . Однако после их получения легко получить выражение для волнового пакета, то есть свертку этих состояний рассеяний, которая уже лежит в \mathcal{L}^2 и является решением.

Опишем способ добавления обобщенной функции ψ к области определения оператора H , который реализован в работах [8–10].

1.8.1. Шкалы гильбертовых пространств

Пусть A — самосопряженный оператор с резольвентой $R(z) = \frac{1}{A-z}$, действующий в гильбертовом пространстве $(\mathcal{H}_0, \langle \cdot | \cdot \rangle_0)$.

Выберем произвольную точку z_0 из резольвентного множества оператора A (дальнейшие построения не зависят от выбора конкретной точки), и для краткости записи, обозначим оператор $R(z_0)$ за Z_0 .

1.8.1.1. Положительная шкала

Для $k > 0$, определим $\mathcal{H}_k = Z_0^k \mathcal{H}_0 = \{Z_0^k \phi \mid \phi \in \mathcal{H}_0\}$. Можно показать, что \mathcal{H}_1 — плотное подмножество \mathcal{H}_0 , и продолжить это по индукции для любых \mathcal{H}_i и \mathcal{H}_j , $i > j$. В каждом \mathcal{H}_k можно определить внутреннее скалярное произведение $\langle f|g \rangle_k = \langle Z_0^{-k} f | Z_0^{-k} g \rangle$ и норму $\|f\|_k = \sqrt{\langle f|f \rangle_k}$.

1.8.1.2. Отрицательная шкала

Для $k > 0$, определим \mathcal{H}_{-k} как пополнение пространства \mathcal{H}_0 по норме $\|f\|_{-k} = \sup_{u \in \mathcal{H}_k} \frac{\langle f|u \rangle_0}{\|u\|_k}$. Фактически, это пространство, сопряженное к \mathcal{H}_k , то есть пространство непрерывных антилинейных функционалов $\{f : \mathcal{H}_k \rightarrow \mathbb{C}\}$. Для любого $f \in \mathcal{H}_{-k}$ будет существовать последовательность $f_n \in \mathcal{H}_0$, сходящаяся к f по норме $\|\cdot\|_{-k}$, такая что для произвольного $g \in \mathcal{H}_k$ существует предел $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n | g \rangle_0$. Таким образом, мы можем продолжить скалярное произведение $\langle \cdot | \cdot \rangle_0$ на пары элементов $\mathcal{H}_{-k} \times \mathcal{H}_k$. В частности, для таких пар будет выполняться неравенство Шварца: $|\langle f | g \rangle_0| \leq \|f\|_{-k} \|g\|_k$.

1.8.2. Предпонтрягинское пространство \mathcal{P}

Для того, чтобы дать интерпретацию действию оператора A на элементе ψ , надо расширить гильбертово пространство \mathcal{H}_0 обобщенным элементом ψ (обозначим за m минимальное положительное число, такое что $\psi \in \mathcal{H}_{-m}$), и определить оператор A в расширенном пространстве. Для начала, нам необходимо пространство \mathcal{P} , сочетающее следующие свойства:

1. содержит обобщенный элемент ψ ;
2. содержит как можно меньше «лишних элементов» из $\mathcal{H}_{-m} \setminus \mathcal{H}_0$;
3. содержит как можно больше элементов из \mathcal{H}_0 ;
4. скалярное произведение $\langle \cdot | \cdot \rangle_{\mathcal{P}}$ на \mathcal{P} должно расширять скалярное произведение $\langle \cdot | \cdot \rangle_0$;
5. $R(z)$ должно быть резольвентой самосопряженного оператора в \mathcal{P} .

Определим искомое пространство как:

$$\mathcal{P} = \{f = f_\phi + \sum_{i=-m}^{m-1} f_i \psi_i \mid f_\phi \in \mathcal{H}_m, f_i \in \mathbb{C}\}$$

, где $\psi_i = Z_0^{m+i} \psi$, то есть, $\psi_i \in \mathcal{H}_i$.

Определим индефинитное скалярное произведение:

$$\langle f|g \rangle_{\mathcal{P}} = \langle f_\phi|g_\phi \rangle_0 + \sum_{i=-m}^{m-1} \langle f_i \psi_i|f_\phi \rangle_0 + \sum_{j=-m}^{m-1} \langle g_\phi|g_j \psi_j \rangle_0 + \sum_{i=-m}^{m-1} \sum_{j=-m}^{m-1} \bar{f}_i G_{ij} g_j$$

, где G_{ij} формально равен $\langle \psi_i|\psi_j \rangle_0$. Не все элементы матрицы G определены (как минимум, не определен $G_{-m,-m}$), в их выборе у нас есть некоторая свобода. На матрицу G наложены следующие ограничения:

- G — эрмитова матрица, что необходимо для эрмитовой симметричности;
- некоторые из элементов G могут быть корректно определены, если ψ_i и ψ_j совместны. В частности, всегда можно корректно определить элементы $G_{i,j}$, для которых $i + j \geq 0$;
- для того, чтобы оператор A в понтрягинском пространстве был самосопряженным, должно выполняться:

$$G_{i,j} = \frac{G_{i-1,j} - G_{i,j-1}}{z_0 - \bar{z}_0}$$

После этого остается $2m$ свободных параметров, которые должны быть зафиксированы из неких физических соображений. К примеру, может быть использована так называемая «ренормализация» расходящихся интегралов, техника, применяемая в квантовой теории поля, которая, в частности, была использована в статье [11].

1.8.3. Понтрягинское пространство Π

В пространстве \mathcal{P} все еще недостаточно структуры, так как:

- оно содержит не все элементы \mathcal{H}_0 , что плохо с физической точки зрения;

- в нем не определена топология, что плохо с математической точки зрения.

Для того чтобы решить эти проблемы, предпонтрягинское пространство будет пополнено в понтрягинское. Определим:

$$\Pi = \{f = (\phi_f, \mathbf{p}_f, \mathbf{n}_f) \mid \phi_f \in \mathcal{H}_0, \mathbf{p}_f \in \mathbb{C}^m, \mathbf{n}_f \in \mathbb{C}^m\}$$

с индефинитным скалярным произведением

$$[f, g] = \langle \phi_f | \phi_g \rangle_0 + \overline{\mathbf{p}_f} \cdot \mathbf{n}_g + \overline{\mathbf{n}_f} \cdot \mathbf{p}_g + \overline{\mathbf{n}_f} \cdot G \cdot \mathbf{n}_g$$

, где G — матрица из элементов $|g_{ij}|_{i,j=-1}^{-m}$.

Π будет понтрягинским пространством индекса m , это можно видеть из того, что форму $[\cdot, \cdot]$ можно привести к диагональному виду преобразованием:

$$(\phi, \mathbf{p}, \mathbf{n}) \mapsto \left(\phi, \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\mathbf{n} + \frac{1}{2} G \mathbf{n} + \mathbf{p} \right), \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\mathbf{n} - \frac{1}{2} G \mathbf{n} - \mathbf{p} \right) \right)$$

, видно что сигнатура формы в новом базисе будет $(1, 1, -1)$, то есть пространство Π будет прямой ортогональной суммой положительного гильбертова пространства $\Pi_+ = \mathcal{H}_0 \oplus \mathbb{C}^m$ и отрицательного $\Pi_- = \mathbb{C}^m$.

\mathcal{P} можно изометрически и плотно вложить в Π :

$$\phi_m + \sum_{i=-m}^{m-1} c_i \psi_i \mapsto \left(\phi_m + \sum_{i=0}^{m-1} c_i \psi_i, \left[\langle \psi_i | \phi_m \rangle_0 + \sum_{j=0}^{m-1} c_j g_{ij} \right]_{i=-1}^{-m}, [c_i]_{i=-1}^{-m} \right)$$

, что означает что пополнение \mathcal{P} и будет понтрягинским пространством Π .

На пространство Π можно продолжить оператор A и его резольвенту с помощью замыкания их образа в пространстве \mathcal{P} .

Физически обосновано понтрягинское пространство следующей теоремой: для любого самосопряженного оператора в понтрягинском пространстве Π индекса m существует инвариантное неположительное подпространство размерности m . За доказательством можно обратиться к работе [12].

Пусть H_Π — гамильтониан в понтрягинском пространстве Π . В работе [13] предложен следующий способ определения физического гильбертова пространства состояний \mathcal{H}_+ (то есть с положительно определенным

скалярным произведением и допускающим вероятностную интерпретацию) и физический гамильтониан H_+ , следующим образом:

1. выбираем инвариантное m -мерное неположительное подпространство L , пусть L^0 — его изотропная часть;
2. L^0 и $L^{[\perp]}$ — инвариантны в силу самосопряженности H_{Π} , при этом $L^{[\perp]}$ — неотрицательно, $L^0 \subseteq L^{[\perp]}$;
3. определим физическое пространство \mathcal{H}_+ как фактор-пространство $L^{[\perp]}/L^0$.

\mathcal{H}_+ будет являться гильбертовым пространством, и также будет инвариантно относительно действия оператора H_{Π} , соответственно, физический гамильтониан H_+ будет просто сужением H_{Π} на \mathcal{H}_+ .

1.9. ТЕРМИНОЛОГИЯ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Состояния рассеяния (англ. scattering states) — решения уравнения Шредингера, соответствующие непрерывному спектру, и не лежащие в L^2 . Также часто называется каналом рассеяния (англ. scattering channel).

Мода (англ. mode) — связанная часть состояния рассеяния. О них обычно говорят в контексте волноводов, имеющих двумерную или трехмерную геометрию, и допускающих только связанные состояния в поперечном направлении. К примеру, в волноводе с конфигурацией $\Omega = [-\infty, \infty] \times [0, H]$ допустимыми поперечными модами являются $\psi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{H}} \sin\left(\frac{\pi n}{H} y\right)$, $n \in \mathbb{N}^+$. Если поперечной частью волны является мода n , говорят, что «волна распространяется на n -й моде».

Открытый канал (англ. open channel) — канал рассеяния, на котором волна потенциально может распространяться при данной энергии E . Замкнутый канал (англ. closed channel) — канал рассеяния, на котором волна не может распространяться при данной энергии E . Для вышеупомянутого примера двумерного волновода при любой энергии E всегда будут открыты каналы $\{n \mid n \in \mathbb{N}^+, \left(\frac{\pi n}{H}\right)^2 < E\}$, которых, очевидно, конечное число.

Глава 2. Описание реализованного подхода

2.1. МОДЕЛЬ ДВУМЕРНОГО ВОЛНОВОДА С ПРЯМОУГОЛЬНЫМ РЕЗОНАТОРОМ

В данной работе будет анализироваться модель волновода следующего вида:

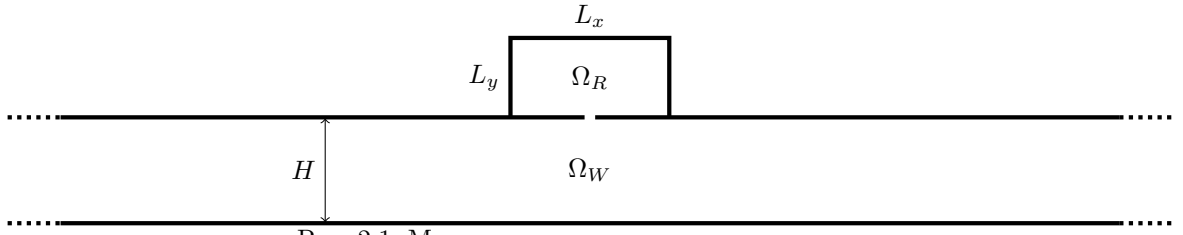


Рис. 2.1: Модель двумерного волновода с резонатором

- область волновода Ω_W бесконечна по координате x в обоих направлениях, и имеет ширину H ;
- область резонатора Ω_R имеет размеры $L_x \times L_y$;
- резонатор и волновод соединены небольшим отверстием ширины S , которое симметрично относительно стенок резонатора;
- в левую часть волновода на определенной моде поступает входящая волна ψ_{inc} ;
- на стенках волновода и резонатора Γ_W, Γ_R стоит условие Дирихле: $\psi|_{\Gamma_W} = 0, \psi|_{\Gamma_R} = 0$, которое означает, что частицы не проникают за внешние стенки.

Целью работы является решение уравнения Шредингера для данной системы: $-\nabla^2\psi = E\psi$, которое будем решать в виде уравнения Гельмгольца: $(\nabla^2 + E)\psi = 0$, получение ее спектральных характеристик, в частности, резонансов и построение зависимости проводимости от геометрии резонатора. Как уже было сказано во введении, для данной задачи не известны аналитические решения, и получение численных решений также представ-

ляет из себя значительную трудность.

Далее зафиксируем начало координат в точке, в которой находится центр отверстия (x_0, y_0) , то есть, $x_0 = 0, y_0 = 0$. В таких координатах: $\Omega_R = [-\frac{L_x}{2}, \frac{L_x}{2}] \times [0, L_y]$, $\Omega_W = [-\infty, \infty] \times [-H, 0]$.

2.2. СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ, ЭНЕРГИИ И ФУНКЦИИ ГРИНА ОБЛАСТЕЙ ЗАДАЧИ

Для дальнейших расчетов понадобятся решения следующих задач:

2.2.1. Одномерная яма с бесконечными стенками

Пусть доменом является $\Omega = [a, b]$ с условиями Дирихле: $\psi(a) = 0, \psi(b) = 0$. Обозначим $L = b - a$, тогда широко известно, что для этой задачи:

- волновые векторы: $\mathbf{k}_n = \frac{\pi n}{L} \hat{\mathbf{x}}, n \in \mathbb{N}^+$;
- собственные энергии: $E_n = k_n^2$, чисто дискретный спектр;
- собственные состояния в координатном представлении:
 $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n(x - a));$
- функция Грина в спектральном разложении выглядит как:

$$G(x, s; E) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi n}{L} s\right)}{E_n - E}$$

, что допускает замкнутый вид:

$$G_{1D}(x, s; E) = - \begin{cases} \frac{\sin(k(x-a)) \sin(k(s-b))}{k \sin(k(b-a))}, & x < s \\ \frac{\sin(k(x-b)) \sin(k(s-a))}{k \sin(k(b-a))}, & x > s \end{cases}$$

, где $k = \sqrt{E}$, в случае $E < 0$ выбирается ветка квадратного корня, в которой $\text{Im } z > 0$.

2.2.2. Одномерная свободная частица

Пусть доменом является $\Omega = (-\infty, \infty)$. Широко известно, что:

- волновые векторы: $\mathbf{k}_p = p\hat{\mathbf{x}}$, $p \in \mathbb{R}$;
- собственные энергии: $E_p = p^2$, имеем чисто непрерывный спектр;
- собственные состояния в координатном представлении:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ik_p x};$$
- функция Грина в спектральном разложении:

$$G(x, s; E) = \int_{p=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{e^{ipx} e^{-ips}}{E_p - E} dp$$

Данный интеграл допускает замкнутое представление:

$$G(x, s; E) = \frac{i}{2k} e^{ik|x-s|}$$

, где $k = \sqrt{E}$, в случае $E < 0$ выбирается ветка квадратного корня, в которой $\text{Im } z > 0$.

2.2.3. Двумерная яма с бесконечными стенками

Пусть доменом является $\Omega = [a_x, b_x] \times [a_y, b_y]$ с условиями Дирихле на границе: $\psi|_{\Gamma} = 0$. Данная задача соответствует области резонатора Ω_R .

Для решения уравнения Шредингера разделим переменные, после чего получим уравнения:

- $-\nabla^2 \psi^x(x) = E^x \psi(x)$;
- $-\nabla^2 \psi^y(y) = E^y \psi(y)$;
- $E^x + E^y = E$.

Эти уравнения соответствуют уже известным уравнениям для одномерной ямы с бесконечными стенками, они определяют полные системы одномерных собственных функций $\{\psi_n^x\}_n$ в $[a_x, b_x]$ и $\{\psi_m^y\}_m$ в $[a_y, b_y]$. Известно, что система функций $\psi_{n,m}(x, y) = \psi_n^x(x) \psi_m^y(y)$ в таком случае тоже будет полной системой функций в $[a_x, b_x] \times [a_y, b_y]$, значит, разделение переменных порождает все решения. Таким образом, получили:

- волновые векторы: $k_{n,m} = \frac{\pi n}{L_x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{\pi m}{L_y} \hat{\mathbf{y}}$, $n \in \mathbb{N}^+$, $m \in \mathbb{N}^+$;
- собственные энергии: $E_{n,m} = k_{n,m}^2$, чисто дискретный спектр;

- собственные состояния в координатном представлении:

$$\psi_{n,m}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{L_x L_y}} \sin(k_n^x(x - a_x)) \sin(k_m^y(y - a_y))$$

- функция Грина в спектральном разложении выглядит как:

$$\begin{aligned} G(x, y, x_s, y_s; E) \\ = \frac{4}{L_x L_y} \sum_{n,m} \frac{\sin(k_n^x(x - a_x)) \sin(k_m^y(y - a_y)) \sin(k_n^x(x_s - a_x)) \sin(k_m^y(y_s - a_y))}{E_{n,m} - E} \end{aligned}$$

2.2.4. Бесконечная квазиодномерная полоса с бесконечными стенками

Пусть доменом является $\Omega = [-\infty; +\infty] \times [a, b]$ с условием Дирихле на границе: $\psi|_{\Gamma} = 0$. Данная задача соответствует области волновода Ω_W .

Для решения уравнения Шредингера разделим переменные, после чего получим уравнения:

- $\nabla^2 \psi^x(x) = E^x \psi(x);$
- $\nabla^2 \psi^y(y) = E^y \psi(y);$
- $E^x + E^y = E.$

По координате x получаем уравнение, соответствующие одномерной свободной частице, по координате y — уравнения для одномерной ямы с бесконечными стенками. Решения каждой из них определяют полные системы функций, значит, разделение переменных порождает все решения. Таким образом:

- волновые векторы: $k_{p,m} = p\hat{\mathbf{x}} + \frac{\pi m}{L_y}\hat{\mathbf{y}}, p \in \mathbb{R}, m \in \mathbb{N}^+;$
- собственные энергии: $E_{p,m} = k_{p,m}^2;$
- собственные состояния в координатном представлении:

$$\psi_{p,m}(x, y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} e^{ipx} \sin(k_m^y y)$$

- функция Грина в спектральном разложении выглядит как:

$$G(x, y, x_s, y_s; E) = \int \sum_p N_p^2 N_m^2 \frac{e^{ipx} e^{-ipx_s} \sin(k_m y) \sin(k_m y_s)}{E_{p,m} - E}$$

Интересной особенностью данной задачи является то, что ее спектр

состоит из непрерывного спектра по измерению x и дискретного спектра по измерению y . В частности, для энергии E собственное подпространство в общем случае вырожденное, и подпространство решений задается произвольными коэффициентами R_m, L_m :

$$\begin{aligned}\psi(x, y) = & \sum_{m=1}^{\frac{\pi^2 m^2}{L_y^2} < E} R_m \sin\left(\frac{\pi m}{L_y} y\right) e^{i\sqrt{E - \pi^2 m^2 / L_y^2} x} \\ & + \sum_{m=1}^{\frac{\pi^2 m^2}{L_y^2} < E} L_m \sin\left(\frac{\pi m}{L_y} y\right) e^{-i\sqrt{E - \pi^2 m^2 / L_y^2} x}\end{aligned}$$

, где коэффициенты R_m соответствуют волнам, распространяющимся вправо, а L_m — волнам, распространяющимся влево, можно видеть, что при достаточно высоких значениях энергии в волноводе может распространяться несколько независимых волн на разных модах. Более того, входящая на определенной моде волна может быть рассеянной на моде с меньшим или большим номером, что представляет собой основную трудность при постановке граничных условий для численного решения.

2.3. АСИМПТОТИКА ПРОИЗВОДНОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА В ОКРЕСТНОСТИ ОТВЕРСТИЯ

Для дальнейших расчетов понадобится асимптотика производной функции Грина по направлению нормали к границе между резонатором и волноводом. Для того, чтобы получить асимптотику функции Грина оператора Гельмгольца у плоской поверхности с условием Дирихле, воспользуемся методом изображений. Выражение функции Грина для уравнения Гельмгольца $(\nabla^2 + k^2)\psi = 0$ в свободном пространстве хорошо известно:

$$G_F(\mathbf{x}, \mathbf{s}; k) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\mathbf{x} - \mathbf{s}|)$$

, где $H_0^{(1)}$ — нулевая функция Ханкеля первого рода [14].

Чтобы найти асимптотику производной функции Грина по нормали, сначала найдем асимптотику функцию Грина в окрестности отверстия

с источником в окрестности отверстия. Зафиксируем $x_s = 0$, и пусть y_s находится близко к 0, тогда:

$$\begin{aligned} G(x, y, 0, y_s; k) &= G_F(x, y, 0, y_s) \\ &\quad - G_F(x, y, 0, -y_s) \\ &\quad + \text{оставшиеся изображения, дающие малый вклад} \end{aligned}$$

Вкладом остальных изображений можно пренебречь, так как значительное влияние будут оказывать только эти два члена. Возьмем производную G по y_s , воспользовавшись тем, что $\frac{\partial H_0^{(1)}(z)}{\partial z} = -H_1^{(1)}(z)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial y_s} &= \frac{i}{4} \frac{\partial}{\partial y_s} \left(H_0^{(1)}(k\sqrt{x^2 + (y - y_s)^2}) - H_0^{(1)}(k\sqrt{x^2 + (y + y_s)^2}) \right) \\ &= \frac{i}{4} \left(-H_1^{(1)}(k\sqrt{x^2 + (y - y_s)^2}) k \frac{-2(y - y_s)}{2\sqrt{x^2 + (y - y_s)^2}} \right. \\ &\quad \left. + H_1^{(1)}(k\sqrt{x^2 + (y + y_s)^2}) k \frac{2(y + y_s)}{2\sqrt{x^2 + (y + y_s)^2}} \right) \end{aligned}$$

Устремив y_s к 0, получим:

$$\frac{\partial G}{\partial y_s}(x, y, 0, 0; k) = \frac{i}{2} k \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} H_1^{(1)}(k\sqrt{x^2 + y^2})$$

Асимптотика функции Ханкеля $H_1^{(1)}$ в окрестности нуля известна:

$$H_1^{(1)}(z) = \frac{C}{z} + Dz + o(z)$$

, где C и D — некоторые константы. Подставляя асимптотику функции Ханкеля в асимптотику производной функции Грина, получим:

$$\frac{\partial G}{\partial y_s}(x, y, 0, 0; k) = \frac{i}{2} k \frac{y}{r} \left(\frac{C}{kr} + Dkr + o(kr) \right) = \frac{i}{2} C \frac{y}{r^2} + \frac{i}{2} D k^2 y + o(r)$$

Можно заметить, что константа перед сингулярным членом асимптотики не зависит от k , нам будет важно, что асимптотика записывается в виде $\frac{A}{r} + B_k r + o(r)$. Из асимптотики видно неинтегрируемую квадратично особенность порядка $\frac{1}{r}$, которая была квадратично интегрируемой в случае условия Неймана, где особенность была порядка $\ln\left(\frac{1}{r}\right)$.

2.4. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ С ОТВЕРСТИЕМ НУЛЕВОЙ ШИРИНЫ

Чтобы получить приближение спектральных характеристик и проводящих свойств данной модели, построим соответствующую ей модель с отверстием нулевой ширины. Заметим, что весь дальнейший анализ по сути сводится к определению домена оператора Гельмгольца $\nabla^2 + E$, поэтому вместо него можно анализировать оператор $\Delta = \nabla^2$, так как прибавление вещественной константы E не изменит домен оператора.

Сузим домены операторов Δ_R и Δ_W до множеств гладких функций, удовлетворяющих условию Дирихле на замыканиях границ Γ_R и Γ_W (то есть, в том числе, и в точке (x_0, y_0)), обозначим полученные операторы Δ_{0R} и Δ_{0W} , оператор для всей области Ω будет их прямой суммой: $\Delta_0 = \Delta_{0R} \oplus \Delta_{0W}$, полученный оператор является симметрическим. Чтобы дать этому оператору какой-то физический смысл, надо убедиться, что можно расширить его до самосопряженного, то есть рассчитать индексы дефекта и выбрать расширение. Однако, у данного оператора индексы дефекта $(0, 0)$, то есть он существенно самосопряжен, что нам не подходит, так как из физических соображений должно существовать расширение, в котором операторы взаимодействуют. Причину зануления индексов дефекта можно видеть, рассмотрев мультипольное разложение элементов $\text{dom } \Delta_0^*$:

$$f(x, y) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i s^i \frac{\partial^i G}{\partial n_s^i}(x, y, x_0, y_0; E_D) + u(x, y)$$

, где s — радиус отверстия, E_D — регулярный параметр модели, $c_i \in \mathbb{C}$, $u \in W^{2,2}$, u зануляется на границах и в отверстии.

Так как функция Грина удовлетворяет тем же граничным условиям, что и дифференциальное уравнение, для которого она получена, то нулевое слагаемое суммы будет равно нулю. Следующий кандидат на дефектный элемент — первая производная функции Грина. Однако, она не принадлежит $\mathcal{L}^2(\Omega)$, что видно из ее асимптотики, что и является причиной

зануления индексов дефекта.

Чтобы получить расширение, необходимо:

- заменить $\mathcal{L}^2(\Omega_R), \mathcal{L}^2(\Omega_W)$ более широкими пространствами функций, в котором лежит первая производная функции Грина;
- определить оператор Δ в расширенном пространстве;
- дать интерпретацию в этом пространстве формальному условию зануления граничной формы, которое определяет возможный выбор домена расширения:

$$\begin{aligned} J(f, g) &= J_R(f, g) + J_W(f, g) \\ &= (\langle \Delta_{0R}^* f | g \rangle - \langle f | \Delta_{0R}^* g \rangle) + (\langle \Delta_{0W}^* f | g \rangle - \langle f | \Delta_{0W}^* g \rangle) \end{aligned}$$

, в частности, определить новое скалярное произведение.

В данной работе выбирается подход с выходом в понтрягинское пространство. Мы сделаем переход от гильбертова пространства $\mathcal{L}^2(\Omega_R) \oplus \mathcal{L}^2(\Omega_W)$ со скалярным произведением $\langle \cdot | \cdot \rangle_\Omega = \langle \cdot | \cdot \rangle_{\Omega_R} + \langle \cdot | \cdot \rangle_{\Omega_W}$ к расширенному понтрягинскому пространству $\Pi = \Pi_R \oplus \Pi_W$, которое будет содержать необходимые для расчетов функции, и в котором будет корректно определено скалярное произведение на них.

2.4.1. Расчет понтрягинского пространства для резонатора

2.4.1.1. Расчет дефектного элемента

Дефектный элемент d — производная функции Грина по нормали в точке $x_s = x_0, y_s = y_0$, то есть для резонатора совпадает с направлением производной по y .

Из выражения для функции Грина:

$$G(x, y, x_s, y_s; E_D) = N_x^2 N_y^2 \sum_{n=1, m=1}^{\infty} \frac{\sin(k_n x + \frac{\pi n}{2}) \sin(k_n x_s + \frac{\pi n}{2}) \sin(k_m y) \sin(k_m y_s)}{E_{n,m} - E_D}$$

, получаем выражение для дефектного элемента:

$$\begin{aligned}
d(x, y) &= \left. \frac{\partial G(x, y, x_s, y_s; E_D)}{\partial n} \right|_{x_s=x_0=0, y_s=y_0=0} \\
&= N_x^2 N_y^2 \sum_{n=1, m=1}^{\infty} \frac{\sin(k_n x + \frac{\pi n}{2}) \sin(\frac{\pi n}{2}) \sin(k_m y) k_m}{E_{n,m} - E_D} \\
&= N_x^2 N_y^2 \sum_{n=1, 2, m=1}^{\infty} \frac{\cos(k_n x) \sin(k_m y) k_m}{E_{n,m} - E_D}
\end{aligned}$$

2.4.1.2. Построение предпонтрягинского пространства

В качестве обобщенного функционала, который необходимо будет учесть в модели, мы возьмем $\psi(x, y) = d(x, y)$. В качестве оператора, на котором будет построена шкала, выберем резольвенту $Z_0 = R_0(i) = \frac{1}{\Delta_0 - i}$, как уже было упомянуто во введении, i подходит как произвольный элемент резольвентного множества оператора Δ_0 (его спектр — неотрицательные вещественные числа), поэтому оператор Z_0 корректно определен и будет ограниченным по определению резольвенты.

Определим порядок предпонтрягинского пространства. Для этого надо определить такое минимальное t , что предпонтрягинское пространство сможет учитывать элемент $\Delta_0 \psi$, который будет фигурировать в граничной форме, то есть такой, что $Z_0^t(\Delta_0 \psi) \in \mathcal{H}_0$, то есть что $Z_0^t(\Delta_0 \psi)$ квадратично интегрируема на Ω_R .

Рассмотрим применение интегрального оператора Z_0 :

$$\begin{aligned}
&(Z_0(\Delta_0 \psi))(x, y) \\
&= \int_{\Omega_R} \sum_{n=1, m=1}^{\infty} N_x^2 N_y^2 \frac{\sin(k_n x + \frac{\pi n}{2}) \sin(k_n x' + \frac{\pi n}{2}) \sin(k_m y) \sin(k_m y')}{k_n^2 + k_m^2 - i} \\
&N_x^2 N_y^2 \sum_{n'=1, m'=1}^{\infty} \frac{(k_{n'}^2 + k_{m'}^2) \sin(k_{n'} x' + \frac{\pi n'}{2}) \sin(\frac{\pi n'}{2}) \sin(k_{m'} y') k_{m'}}{k_{n'}^2 + k_{m'}^2 - E_D} \\
&= N_x^2 N_y^2 \sum_{n=1, m=1}^{\infty} \frac{(k_n^2 + k_m^2) \sin(k_n x + \frac{\pi n}{2}) \sin(\frac{\pi n}{2}) \sin(k_m y) k_m}{(k_n^2 + k_m^2 - i)(k_n^2 + k_m^2 - E_D)}
\end{aligned}$$

Легко заметить, что

$$\begin{aligned} (Z_0^t(\Delta_0\psi))(x, y) &= N_x^2 N_y^2 \sum_{n=1, m=1}^{\infty} \frac{(k_n^2 + k_m^2) \sin(k_n x + \frac{\pi n}{2}) \sin(\frac{\pi n}{2}) \sin(k_m y) k_m}{(k_n^2 + k_m^2 - i)^t (k_n^2 + k_m^2 - E_D)} \\ &= N_x^2 N_y^2 \sum_{n=1, 2, m=1}^{\infty} \frac{(k_n^2 + k_m^2) \cos(k_n x) \sin(k_m y) k_m}{(k_n^2 + k_m^2 - i)^t (k_n^2 + k_m^2 - E_D)} \end{aligned}$$

Тогда норма обобщенного элемента будет равна:

$$\begin{aligned} \langle Z_0^t(\Delta_0\psi) | Z_0^t(\Delta_0\psi) \rangle &= \int_{\Omega_R} \overline{Z_0^t(\Delta_0\psi)(x, y)} Z_0^t(\Delta_0\psi)(x, y) dx dy \\ &\propto \sum_{n=1, 2, m=1}^{\infty} \frac{(n^2 + m^2)m}{(n^2 + m^2 - i)^t (n^2 + m^2 - E_D)} \frac{(n^2 + m^2)m}{(n^2 + m^2 - i)^t (n^2 + m^2 - E_D)} \\ &= \sum_{n=1, 2, m=1}^{\infty} \frac{(n^2 + m^2)^2 m^2}{(n^2 + m^2)^2 + 1)^t (n^2 + m^2 - E_D)^2} \end{aligned}$$

Для исследования сходимости данного ряда воспользуемся интегральным признаком сходимости и перейдем в полярные координаты:

$$\int_{r=1}^{\infty} \int_{\phi=0}^{\pi/2} \frac{r^4 r^2 \sin^2 \phi}{(r^4 + 1)^t (r^2 - E_D)^2} r dr d\phi = \int_{r=1}^{\infty} \frac{r^7}{(r^4 + 1)^t (r^2 - E_D)^2} dr$$

Минимальное t , для которого интеграл конечен, равно 2, значит, $\Delta_0\psi \in \mathcal{H}_{-2}$. Пространство \mathcal{P} состоит из:

$$f(x, y) = f_\phi(x, y) + f_1(Z_0^2\psi)(x, y) + f_0(Z_0\psi)(x, y) + f_{-1}\psi(x, y) + f_{-2}(Z_0^{-1}\psi)(x, y)$$

Матрица G для скалярного произведения:

$$\begin{array}{c} \begin{matrix} & 1 & 0 & -1 & -2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{matrix} \begin{bmatrix} \langle | \rangle_0 & \langle | \rangle_0 & \langle | \rangle_0 & \langle | \rangle_0 \\ \langle | \rangle_0 & \langle | \rangle_0 & \langle | \rangle_0 & G_{0,-2} \\ \langle | \rangle_0 & \langle | \rangle_0 & G_{-1,-1} & G_{-1,-2} \\ \langle | \rangle_0 & G_{-2,0} & G_{-2,-1} & G_{-2,-2} \end{bmatrix} \end{array}$$

Скалярные произведения для элементов $G_{i,j}$ с $i + j \geq -1$, сходятся по интегральному признаку, поэтому их можно получить непосредственно. Остальные элементы определяются следующим образом:

1. зафиксируем

(a) $\operatorname{Re} G_{-1,-1} = a;$

(b) $\operatorname{Re} G_{-2,0} = b;$

(c) $\operatorname{Re} G_{-2,-1} = c;$

(d) $\operatorname{Re} G_{-2,-2} = d;$

2. $G_{-1,-1} = a = \frac{G_{-2,-1} - G_{-1,-2}}{2i} = \frac{(c+i \operatorname{Im} G_{-2,-1}) - (c-i \operatorname{Im} G_{-2,-1})}{2i} = \operatorname{Im} G_{-2,-1}$

3. $G_{-1,0} = \frac{G_{-2,0} - G_{-1,-1}}{2i} = \frac{b+i \operatorname{Im} G_{-2,0} - a}{2i}$, из чего можно выразить $\operatorname{Im} G_{-2,0} = 2G_{-1,0} + i(b - a).$

После этого, воспользовавшись эрмитовой симметричностью, определим оставшиеся элементы. Таким образом, у нас имеется четыре свободных вещественных параметра a, b, c, d , которые фиксируются с помощью ренормализации расходящихся интегралов [11].

2.4.1.3. Переход в понтрягинское пространство

Заметим, что формально:

$$\Delta_0 \psi_j = \Delta_0 Z_0^{m+j} \psi = \Delta_0 \frac{1}{\Delta_0 - i} Z_0^{m+j-1} \psi = (1 + i Z_0) Z_0^{m+j-1} \psi = \psi_{j-1} + i \psi_j$$

Напомним, что нас будет интересовать скалярное произведение $\langle \Delta f | g \rangle$. Надо вложить в понтрягинское пространство следующие элементы:

- d : шкалы были построены на этом функционале, поэтому:

$$d \mapsto (0; 0, 0; 1, 0)$$

- $\Delta_{\Pi} d$:

$$\Delta_{\Pi} d \mapsto (0; 0, 0; i, 1)$$

- $u \in \operatorname{dom} \Delta$:

$$u \mapsto (u; \langle \psi_{-1} | u \rangle, \langle \psi_{-2} | u \rangle); 0, 0)$$

- $\Delta_{\Pi} u$:

$$\Delta_{\Pi} u \mapsto (\Delta u; \langle \psi_{-1} | \Delta u \rangle, \langle \psi_{-2} | \Delta u \rangle); 0, 0)$$

Распишем граничную форму $J_R(u, v) = [\Delta_{\Pi} f, g] - [f, \Delta_{\Pi} g]$. Пусть $f(x, y) = \alpha_f d(x, y) + u(x, y)$, $g(x, y) = \alpha_g d(x, y) + v(x, y)$.

$$\begin{aligned} f &\xrightarrow{\Pi} (u, \langle \psi_{-1}|u \rangle, \langle \psi_{-2}|u \rangle, \alpha_f, 0) \\ \Delta_{\Pi} f &\xrightarrow{\Pi} (\Delta u, \langle \psi_{-1}|\Delta u \rangle, \langle \psi_{-2}|\Delta u \rangle, i\alpha_f, \alpha_f) \\ g &\xrightarrow{\Pi} (v, \langle \psi_{-1}|v \rangle, \langle \psi_{-2}|v \rangle, \alpha_g, 0) \\ \Delta_{\Pi} g &\xrightarrow{\Pi} (\Delta v, \langle \psi_{-1}|\Delta v \rangle, \langle \psi_{-2}|\Delta v \rangle, i\alpha_g, \alpha_g) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\Delta_{\Pi} f, g] &= \langle \Delta u|v \rangle \\ &\quad + \overline{\langle \psi_{-1}|\Delta u \rangle} \alpha_g \\ &\quad + i\overline{\alpha_f} \langle \psi_{-1}|v \rangle + \overline{\alpha_f} \langle \psi_{-2}|v \rangle \\ &\quad + i\overline{\alpha_f} G_{-1,-1} \alpha_g + \overline{\alpha_f} G_{-2,-1} \alpha_g \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [f, \Delta_{\Pi} g] &= \langle u|\Delta v \rangle \\ &\quad + \overline{\langle \psi_{-1}|u \rangle} i\alpha_g + \overline{\langle \psi_{-2}|u \rangle} \alpha_g \\ &\quad + \overline{\alpha_f} \langle \psi_{-1}|\Delta v \rangle \\ &\quad + \overline{\alpha_f} G_{-1,-1} i\alpha_g + \overline{\alpha_f} G_{-1,-2} \alpha_g \end{aligned}$$

Заметим, что

1. $\langle u|\Delta v \rangle - \langle \Delta u|v \rangle = 0$, так как элементы u и v лежат в домене самосопряженного оператора Δ ;
2. $\langle \psi_{-1}|\Delta u \rangle - (i\langle \psi_{-1}|u \rangle + \langle \psi_{-2}|u \rangle) = \langle \psi_{-1}|\Delta u \rangle - \langle \Delta \psi_{-1}|u \rangle$. Непосредственно применять тождество Грина нельзя, так как в точке 0 присутствует сингулярность. Будем считать скалярные произведения по области с выколотым полукругом радиуса r и устремим r к нулю. Тогда можно приметить тождество Грина, и свести интеграл к интегралу по контуру области с выколотым полукругом. Однако, данный интеграл по части контура, пересекающейся с границей Γ будет

нулевой, так как там функции удовлетворяют граничным условиям Дирихле и обращаются в ноль. Интеграл же по оставшейся части, то есть по полуокружности, равен:

$$\int_{\phi=-\pi/2}^{\pi/2} \left(\overline{\psi_{-1}} \frac{\partial u}{\partial r} - u \frac{\partial \overline{\psi_{-1}}}{\partial r} \right) r d\phi$$

Подставим сюда асимптотические значения $\psi_{-1}(r) = \frac{A}{r} + B_{ED}r + o(r)$, что уже было рассчитано ранее, $u(r) = br + o(r)$, что видно из того, что функции удовлетворяют условию Дирихле, то есть константный член асимптотики зануляется. Получим:

$$\int_{\phi=-\pi/2}^{\pi/2} \left(\overline{\left(\frac{A}{r} + B_{ED}r \right)} b - br \overline{\left(-\frac{A}{r^2} + B_{ED} \right)} \right) r d\phi = 2\pi \bar{A}b$$

Так как A — чисто вещественное, получаем в итоге: $\langle \psi_{-1} | \Delta u \rangle - (\bar{i} \langle \psi_{-1} | u \rangle + \langle \psi_{-2} | u \rangle) = 2\pi \bar{A}b$.

3. Для $\langle \psi_{-1} | \Delta v \rangle$ поступаем аналогично предыдущему пункту.
4. $\bar{i}G_{-1,-1} + G_{-2,-1} - iG_{-1,-1} - G_{-1,-2} = 0$, что видно из зафиксированной выше параметризации скалярного произведения.

В итоге, получаем:

$$J_R(u, v) = 2\pi A(a_R^g \bar{b}_R^u - \overline{a_R^f} b_R^v)$$

2.4.2. Расчет понтрягинского пространства для волновода

2.4.2.1. Расчет дефектного элемента

Аналогично случаю резонатора, дефектный элемент — производная функции Грина по нормали к границе, то есть, $-\frac{\partial G_W}{\partial y}$.

Функция Грина:

$$G_W(x, y, x_s, y_s; E) = \int_p \sum_m N_x^2 N_y^2 \frac{e^{ipx} e^{-ipx_s} \sin(k_m y) \sin(k_m y_s)}{E_{p,m} - E}$$

$$d_W(x, y) = -\frac{\partial G_W(x, y, x_0, y_0; E_D)}{\partial y}(x, y) = \int_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} N_x^2 N_y^2 \frac{e^{ipx} \sin(k_m y) k_m}{E_{p,m} - E}$$

2.4.2.2. Построение предпонтрягинского пространства

Аналогично случаю резонатора, в качестве обобщенного элемента, на котором строятся шкалы, берется $\psi(x, y) = d_W(x, y)$. Рассмотрим применение Z_0 к $\Delta_0 \psi$:

$$\begin{aligned} (Z_0(\Delta_0 \psi))(x, y) &= \int_{\Omega_W} \int_p N_x^2 N_y^2 \sum_m \frac{e^{ipx} e^{-ipx'} \sin(k_m y) \sin(k_m y')}{E_{p,m} - i} \\ &\quad \int_{p'} \sum_{m'} N_x^2 N_y^2 \frac{(p'^2 + k_{m'}^2) e^{ip'x'} \sin(k_{m'} y') k_{m'}}{E_{p',m'} - E_D} \\ &= \int_p \sum_m N_x^2 N_y^2 \frac{(p^2 + k_m^2) e^{ipx} \sin(k_m y) k_m}{(E_{p,m} - i)(E_{p,m} - E_D)} \end{aligned}$$

Легко заметить, что:

$$(Z_0^t(\Delta_0 \psi))(x, y) = \int_p \sum_m N_x^2 N_y^2 \frac{(p^2 + k_m^2) e^{ipx} \sin(k_m y) k_m}{(E_{p,m} - i)^t (E_{p,m} - E_D)}$$

Определим порядок предпонтрягинского пространства:

$$\begin{aligned} \langle Z_0^t(\Delta_0 \psi) | Z_0^t(\Delta_0 \psi) \rangle &= \int_{\Omega_W} \overline{(Z_0^t(\Delta_0 \psi))(x, y)} (Z_0^t(\Delta_0 \psi))(x, y) \\ &\propto \int_p \sum_m \frac{(p^2 + m^2)^2 m^2}{((p^2 + m^2)^2 + 1)^t (p^2 + m^2 - E_D)^2} \end{aligned}$$

Аналогично случаю резонатора, данный интеграл сходится по интегральному признаку сходимости при $t = 2$, то есть $\Delta_0 \psi \in \mathcal{H}_{-2}$, пространство \mathcal{P} состоит из:

$$f(x, y) = f_\phi(x, y) + (Z_0^2 \psi)(x, y) f_1 + (Z_0 \psi)(x, y) f_0 + \psi(x, y) f_{-1} + f_{-2} (Z_0^{-1} \psi)(x, y)$$

2.4.2.3. Переход в понтрягинское пространство

Параметризация скалярного произведения и расчеты граничной формы полностью аналогичны случаю резонатора. В итоге получаем граничную форму:

$$J_W(u, v) = 2\pi A(a_W^g \overline{b_W^u} - \overline{a_W^f} b_W^v)$$

2.5. РАСШИРЕНИЕ МОДЕЛИ В ПОНТРЯГИНСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ

2.5.1. Фиксация расширения и получение явной формы волновой функции

Напомним, что домен оператора в окрестности нуля состоит из элементов вида:

$$\begin{cases} a_R d_R(\mathbf{r}; E_D) + b_R r + o(r) & , \mathbf{r} \in \Omega_R \\ a_W d_W(\mathbf{r}; E_D) + b_W r + o(r) & , \mathbf{r} \in \Omega_W \end{cases}$$

, где E_D — регулярный параметр модели. Надо зафиксировать соотношения между a_R, a_W, b_R, b_W , чтобы получить самосопряженное расширение. Для этого рассмотрим граничную форму в пространстве $\Pi = \Pi_R \oplus \Pi_W$:

$$\begin{aligned} J(f_R \oplus f_W, g_R \oplus g_W) &= J_R(f_R, g_R) + J_W(f_W, g_W) \\ &= 2\pi A(a_R^g \overline{b_R^u} - \overline{a_R^f} b_R^v + a_W^g \overline{b_W^u} - \overline{a_W^f} b_W^v) = 0 \end{aligned}$$

Удовлетворить данное тождество можно следующим образом:

$$a_R = -a_W$$

$$b_R = b_W$$

Фактически, мы сшиваем по непрерывности асимптотики несингулярных элементов домена в окрестности отверстия ($b_R = b_W$), и нулевой поток из отверстия ($a_R = -a_W$).

Решение задачи мы ищем в виде:

$$\begin{cases} \alpha_W d_R(\mathbf{r}; E) & , \mathbf{r} \in \Omega_R \\ \alpha_W d_W(\mathbf{r}; E) + u_{inc}(\mathbf{r}) & , \mathbf{r} \in \Omega_W \end{cases}$$

, где E — полная энергии входящей волны, и u_{inc} — входящая в волновод волна. Асимптотикой такой формы решения в окрестности отверстия является:

$$\begin{cases} \alpha_W d_R(\mathbf{r}; E) & , \mathbf{r} \in \Omega_R \\ \alpha_W d_W(\mathbf{r}; E) + \frac{\partial u_{inc}}{\partial n}(\mathbf{r}) & , \mathbf{r} \in \Omega_W \end{cases}$$

Засчет того, что сингулярный член асимптотики дефектного элемента не зависит от E , можем вычислить следующие величины:

- $F_R = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{d_R(x, y; E) - d_R(x, y; E_D)}{r}$;
- $F_W = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{d_W(x, y; E) - d_W(x, y; E_D)}{r}$.

Пользуясь этим, получим:

- $a_R = \alpha_R$
- $a_W = \alpha_W$
- $b_R = \alpha_R F_R$
- $b_W = \alpha_W F_W + \frac{\partial u_{inc}}{\partial n}(\mathbf{0})$

Воспользовавшись условиями нашего расширения, можно выразить все через, например, α_W , получив $-\alpha_W F_R = \alpha_W F_W + \frac{\partial u_{inc}}{\partial n}(\mathbf{0})$, из чего выражается:

- $\alpha_W = \frac{-\frac{\partial u_{inc}}{\partial n}(\mathbf{0})}{F_R + F_W}$
- $\alpha_R = -\alpha_W$

После получения решения в явном виде мы можем строить функции плотности вероятности при различных конфигурациях системы и различных энергиях.

2.5.2. Расчет коэффициента прохождения

Рассмотрим, как можно получать коэффициент прохождения: из геометрии системы ясно, что поток вероятности по координате y практически отсутствует. Чтобы посчитать суммарный поток по координате x , надо рассчитать величину $J_x = \lim_{x \rightarrow x_\infty} \int_{y=-H}^0 j_x(x, y) dy$, где x_∞ — некоторое асимптотическое значение, в идеале равное $\pm\infty$ (знак в зависимости от того, для

входящей или прошедшей волны считается коэффициент), а при численном счете — просто некоторое большое значение. После этого, получив значения J_{inc} , J_{trans} для входящей волны ψ_{inc} , и для прошедшей $\psi_{trans} = \alpha_W d_W + \psi_{inc}$, сможем рассчитать коэффициент прохождения $T = \frac{|J_{trans}|}{|J_{inc}|}$. Самый простой вариант — воспользоваться численным дифференцированием и интегрированием для расчета этого коэффициента, однако, и здесь можно воспользоваться явной формой полученного решения следующим образом.

Далее за z_m обозначим продольное волновое число, то есть $z_m = \sqrt{E - E_m^W}$. Входящая на m -й моде волна имеет вид $\psi_{inc}(x, y) = \psi_m^W(y)e^{iz_mx}$. Ток вероятности для нее в фиксированной точке (x, y) рассчитывается как:

$$\begin{aligned} j(x, y) &= \overline{\psi_{inc}(x, y)} \frac{\partial \psi_{inc}}{\partial x}(x, y) - \psi_{inc}(x, y) \overline{\frac{\partial \psi_{inc}}{\partial x}(x, y)} \\ &= \psi_m^W(y) e^{-iz_mx} \psi_m^W(y) (iz_m) e^{iz_mx} \\ &\quad - \psi_m^W(y) e^{iz_mx} \psi_m^W(y) (-iz_m) e^{-iz_mx} \\ &= (\psi_m^W(y))^2 2iz_m \end{aligned}$$

Легко заметить, что J_{inc} , равное интегралу данной величины по y от $-H$ до 0 , будет равно $2iz_m$, так как интеграл квадрата собственной функции ψ_m^W нормирован к единице.

Выражение для прошедшей волны:

$$\begin{aligned} \psi_{trans}(x, y) &= \psi_{inc}(x, y) + \alpha_W d_W(x, y; E) \\ &= \psi_m^W(y) e^{iz_mx} + \alpha_W \sum_{m'} \psi_{m'}^W(y) \psi_{m'}^{'W}(y_0) \frac{i}{2z_{m'}} e^{iz_{m'}x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int \overline{\psi_{trans}(x, y)} \frac{\partial \psi_{trans}}{\partial x}(x, y) \\
& \int (\psi_m^W(y) e^{-iz_m x} + \overline{\alpha_W} \sum_{m'} \psi_{m'}^W(y) \psi_{m'}'^W(y_0) \frac{-i}{2\overline{z_{m'}}} e^{-i\overline{z_{m'}}x}) \\
& (\psi_m^W(y) i z_m e^{iz_m x} + \alpha_W \sum_{m'} \psi_{m'}^W(y) \psi_{m'}'^W(y_0) \frac{-1}{2} e^{iz_{m'}x}) \\
& = i z_m \\
& + \alpha_W \psi_m'^W(y_0) \frac{-1}{2} \\
& + i z_m \overline{\alpha_W} \psi_m'^W(y_0) \frac{-i}{2z_m} \\
& + |\alpha_W|^2 \sum_{m'} (\psi_{m'}'^W(y_0))^2 \frac{i}{4\overline{z_{m'}}} e^{i(z_{m'} - \overline{z_{m'}})x} \\
& \int \psi_{trans}(x, y) \overline{\frac{\partial \psi_{trans}}{\partial x}(x, y)} \\
& \int (\psi_m^W(y) e^{iz_m x} + \alpha_W \sum_{m'} \psi_{m'}^W(y) \psi_{m'}'^W(y_0) \frac{i}{2z_{m'}} e^{iz_{m'}x}) \\
& (\psi_m^W(y) (-i z_m) e^{-iz_m x} + \overline{\alpha_W} \sum_{m'} \psi_{m'}^W(y) \psi_{m'}'^W(y_0) \frac{-1}{2} e^{-i\overline{z_{m'}}x}) \\
& = -i z_m \\
& + \overline{\alpha_W} \psi_m'^W(y_0) \frac{-1}{2} \\
& + (-i z_m) \alpha_W \psi_m'^W(y_0) \frac{i}{2z_m} \\
& + |\alpha_W|^2 \sum_{m'} (\psi_{m'}'^W(y_0))^2 \frac{-i}{4z_{m'}} e^{i(z_{m'} - \overline{z_{m'}})x}
\end{aligned}$$

Заметим, что суммы можно разбить на суммирование по открытым каналам (энергия продольной волны положительна, $z_{m'}$ чисто вещественное) и по закрытым (энергия продольной волны отрицательна, $z_{m'}$ чисто комплексное, $\text{Im } z_{m'} > 0$). Сумму ряда с закрытыми каналами можно оценить как $\sum_{m'} (m')^2 \frac{1}{m'} e^{-(m')^2 x}$, что сходится по интегральному признаку для любого $x > 0$, и стремится к нулю при $x \rightarrow \infty$, поэтому суммирование по

закрытым каналам можно откинуть, после чего получаем окончательное выражение для J_{trans} :

$$J_{trans} = 2iz_m - \alpha_W \psi_m^{'W}(y_0) + \overline{\alpha_W} \psi_m^{'W}(y_0) + |\alpha_W|^2 \sum_{m'=1}^{E_{m'}^W < E} (\psi_{m'}^{'W}(y_0))^2 \frac{i}{2z_{m'}}$$

Глава 3. Результаты

Зафиксируем следующую геометрию волновода:

- $L_x = 200$ боровских радиусов (порядка 10 нм);
- $L_y = 100$ боровских радиусов (порядка 5 нм);
- $H = 100$ боровских радиусов (порядка 5 нм);
- $S = 10$ боровских радиусов (порядка 0.5 нм).

Пусть слева поступает входящая волна на первой моде:

$$\psi_{inc}(x, y) = \sqrt{\frac{2}{H}} \sin\left(\frac{\pi}{H}y\right) e^{i\sqrt{E-\pi^2/H^2}x}$$

Далее приведены результаты, полученные в рамках подхода, описанного в главе 2.

3.1. ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ПРОХОЖДЕНИЯ ОТ ЭНЕРГИИ ВХОДЯЩЕЙ ВОЛНЫ ПРИ ФИКСИРОВАННОЙ ГЕОМЕТРИИ РЕЗОНАТОРА

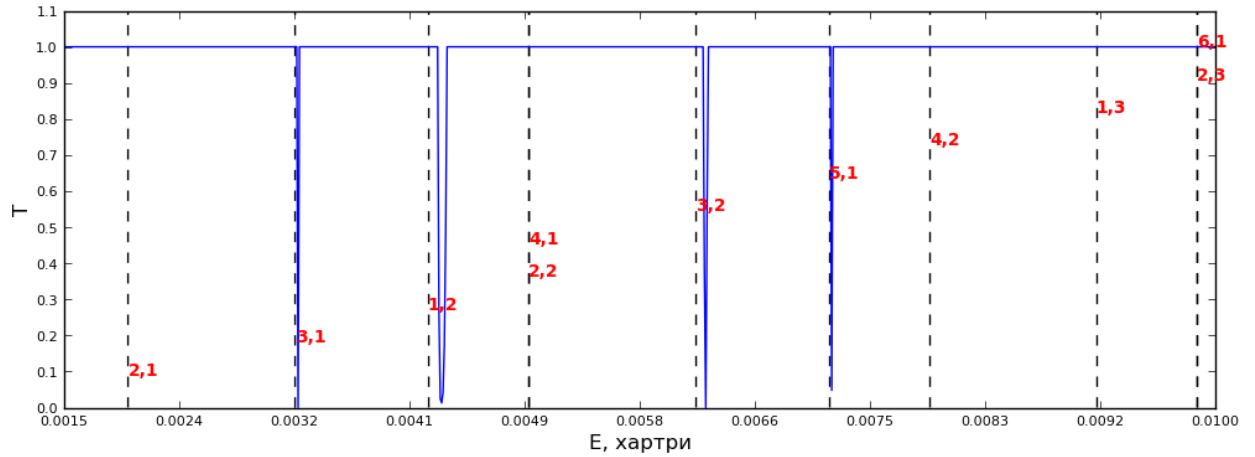


Рис. 3.1: Зависимость коэффициента прохождения от энергии при фиксированной геометрии. Вертикальные пунктирные линии соответствуют собственным энергиям резонатора, красными парами чисел обозначены номера состояний.

Как и ожидалось, в большинстве случаев коэффициент прохождения равен 1. Падения коэффициента прохождения соответствуют тому, что

волновая функция «чувствует» резонатор при некоторых энергиях, имеющих некоторую связь с собственными энергиями резонатора.

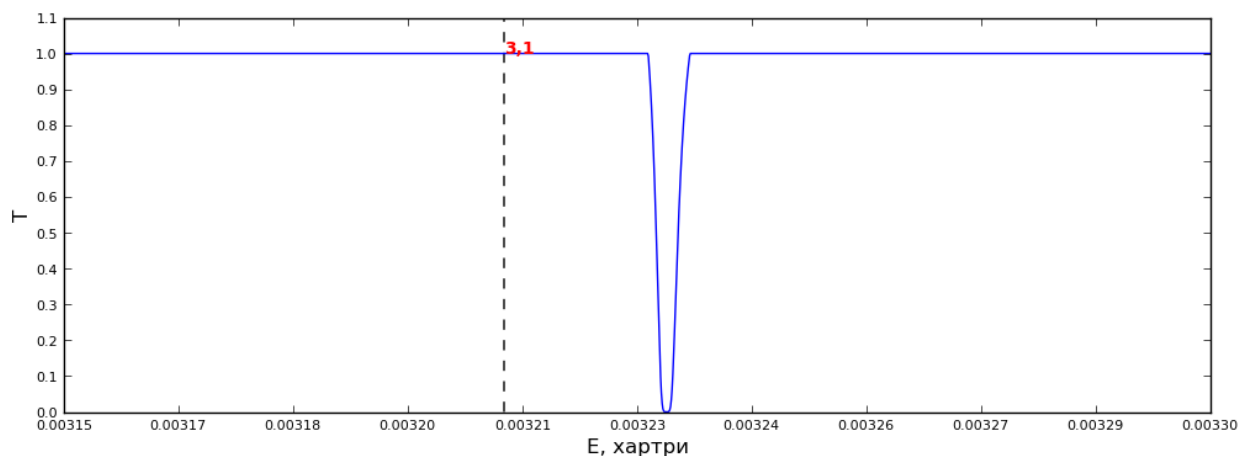


Рис. 3.2: Зависимость коэффициента прохождения от энергии при фиксированной геометрии в окрестности собственной энергии резонатора, соответствующей состоянию (3, 1).

На рисунке 3.2 приведена часть графика 3.1 в окрестности собственного состояния резонатора (3, 1) в увеличенном масштабе.

3.2. ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ

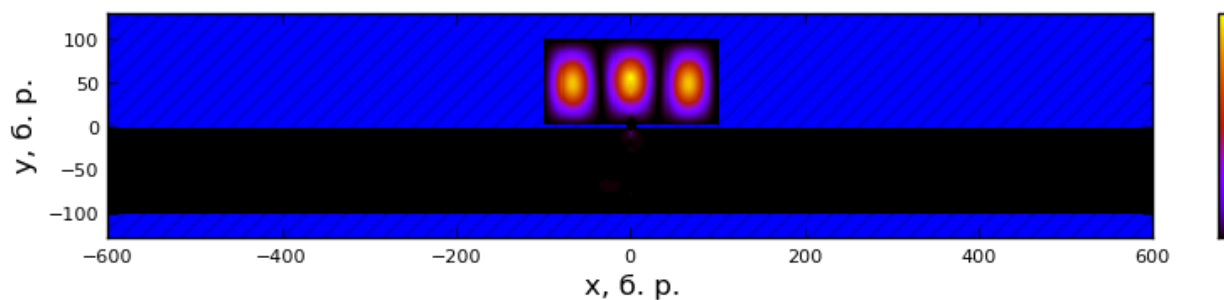


Рис. 3.3: Плотность вероятности в резонансной точке.

На рисунке 3.3 можно наблюдать плотность вероятности волновой функции в точке, соответствующей резонансу на рисунке 3.2. Как и ожидалось, она вся сконцентрирована в области резонатора, и потока вероятности через волновод почти не наблюдается, коэффициент прохождения равен 0.

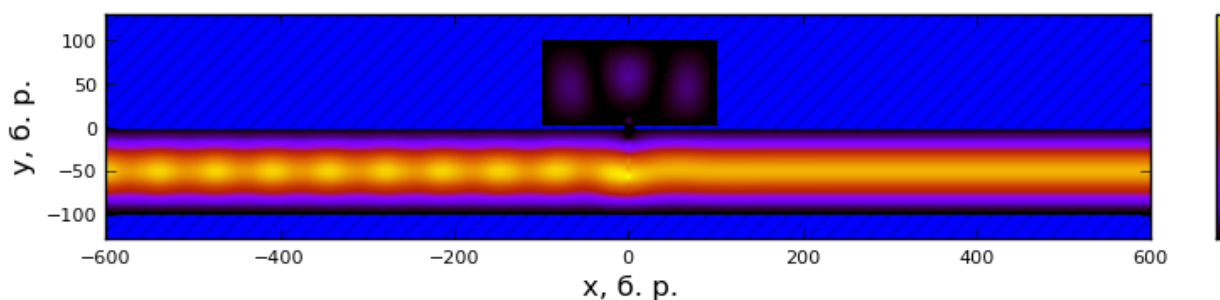


Рис. 3.4: Плотность вероятности в окрестности резонансной точки.

На рисунке 3.4 можно наблюдать плотность вероятности волновой функции в точке, находящейся чуть правее резонанса на рисунке 3.2. Здесь наблюдается поток вероятности через волновод, коэффициент прохождения — почти 1.

3.3. ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ПРОХОЖДЕНИЯ ОТ ГЕОМЕТРИИ РЕЗОНАТОРА

Из рисунка 3.1 видно, что падения коэффициента прохождения достаточно резкие, поэтому если прибор будет работать на энергии, близкой к энергии, при которой происходит падение коэффициента прохождения, небольшим изменением геометрии резонатора можно получить большой скачок коэффициента прохождения. Приведем пример варьирования ширины резонатора в окрестности резонанса.

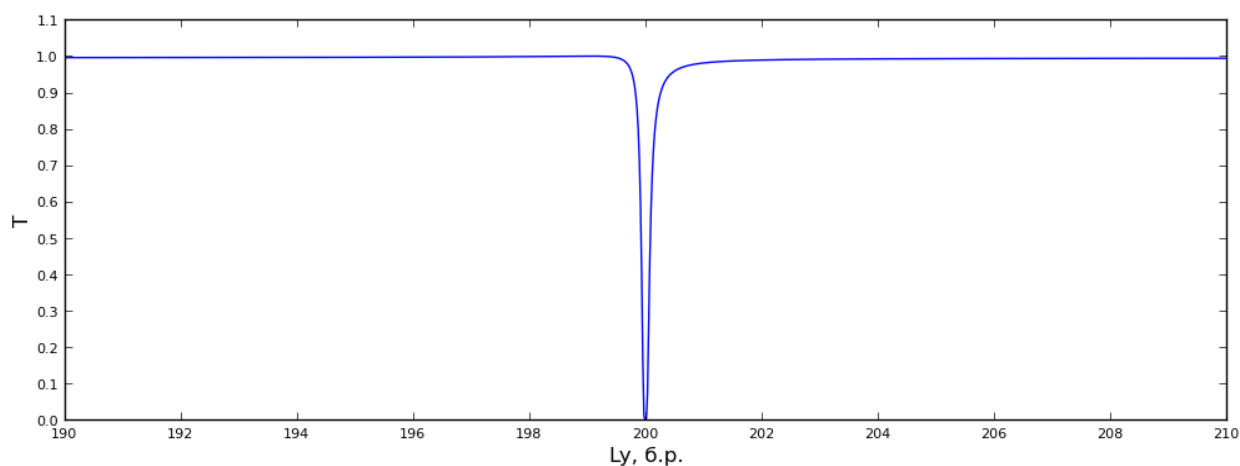


Рис. 3.5: Зависимость проводимости от ширины резонатора в окрестности резонанса.

На рисунке 3.5 можно видеть резкую впадину в коэффициенте прохождения в районе $L_y = 200$. Если физически реализовать резонатор как квантовую точку, ее ширину можно будет контролировать, и при изменении ширины резонатора на 0.1%, коэффициент прохождения изменится от нуля до единицы (или наоборот), что соответствует переключению состояния транзистора.

Заключение

В работе предложен метод получения приближенных спектральных и проводящих характеристик двумерного волновода сложной структуры, основанный на самосопряженных расширениях симметрических операторов и выходе в понтрягинское пространство функций. Для моделей подобных конфигураций не существует аналитических решений, способы численного решения автору также неизвестны.

Данная работа отличается новизной, так как ранее подобные вычисления были проделаны только для волноводов с граничным условием Неймана [5], которое, во-первых, не является физически обоснованным, а во-вторых, значительно проще для вычислений в рамках теории расширений симметрических операторов в том смысле, что расчеты могут быть проделаны в пространстве \mathcal{L}^2 .

На основе полученных результатов сделан вывод, что данная модель подходит в качестве возможной реализации наноразмерных транзисторов, непосредственно использующих квантовые эффекты. Построена зависимость коэффициента прохождения от энергии входящей волны и обнаружены резонансы. Построена зависимость коэффициента прохождения от геометрии резонатора, на которой также обнаруживается резонанс, что позволяет использовать данную нелинейность в коэффициенте прохождения для реализации транзистора.

Результаты данной работы также могут быть использованы в расчетах расширений для более сложных квантомеханических операторов, в частности, оператора Дирака, учитывающего релятивистские эффекты, и более сложных моделей, например, трехмерных волноводов.

Список литературы

1. Intel 22 nm technology. <http://www.intel.com/content/www/us/en/silicon-innovations/intel-22nm-technology.html>.
2. 14 nm technology. http://en.wikipedia.org/wiki/14_nanometer.
3. *Popov I. Y.* The extension theory and the opening in semitransparent surface // Journal of mathematical physics. 1992. №5. С. 1685–1689.
4. *Popov I. Y.* The resonator with narrow slit and the model based on the operator extensions theory // Journal of mathematical physics. 1992. №11. С. 3794–3801.
5. *Popov I. Y., Popova S.* Zero-width slit model and resonances in mesoscopic systems // EPL (Europhysics Letters). 1993. №5. С. 373.
6. *Азизов Т. Я., Копачевский Н. Д.* Введение в теорию пространств Крейна. Специальный курс лекций. ООО "Форма", 2010. <http://nikolay-d-kopachevsky.com/files/AK2010.pdf>.
7. *Азизов Т. Я., Копачевский Н. Д.* Введение в теорию пространств Понтрягина. Специальный курс лекций. ООО "Форма", 2008. <http://nikolay-d-kopachevsky.com/VTPP.pdf>.
8. *Van Diejen J., Tip A.* Scattering from generalized point interactions using self-adjoint extensions in Pontryagin spaces // Journal of mathematical physics. 1991. №3. С. 630–641.
9. *Dijkma A., Langer H., Shondin Y., Zeinstra C.* Self-adjoint operators with inner singularities and Pontryagin spaces. B: Operator theory and related topics. Springer, 2000. С. 105–175.
10. *Dijkma A., Shondin Y.* Singular point-like perturbations of the Bessel operator in a Pontryagin space // Journal of Differential Equations. 2000. №1. С. 49–91.
11. *Березин Ф. А.* О модели Ли // Математический сборник. 1963. №4. С. 425–446.
12. *Понтрягин Л. С.* Эрмитовы операторы в пространстве с индефинитной метрикой // Известия Российской академии наук. Серия математическая. 1944. №6. С. 243–280.
13. *Шондин Ю. Г.* Возмущения на тонких множествах высокой коразмерности эллиптических операторов и теория расширений в пространстве с индефинитной метрикой // Записки научных семинаров ПОМИ. 1995. С. 246–292.
14. Hankel Function of the First Kind. <http://mathworld.wolfram.com/HankelFunctionoftheFirstKind.html>.