Метод R-матриц и резонансные эффекты в квантовых волноводах

Дмитрий Герасимов
научный руководитель:
д.ф.-м.н., профессор кафедры ВМ, И.Ю.Попов

Университет ИТМО

19 июня 2014 года

Мотивация

- Почти все полупроводники, использующиеся на данный момент для интегральных схем — полевые транзисторы (MOSFET)
- Необходимость уменьшать размеры полупроводниковых приборов
  - Производительность (конечная скорость распространения сигнала + скорость переключения состояния)
  - Тепловыделение (меньшее напряжение затвора)
  - Более эффективное использование полупроводниковой пластины (более плотная упаковка)
- Текущие технологии: транзисторы размером 22 нм, в 2014 ожидается 14 нм
- На размерах около 10 нм проявляется туннелирование через затвор (ток утечки) и между транзисторами (интерференция)
- Необходимо учитывать квантовые (в частности, туннельные) эффекты

Альтернативная реализация транзистора

- ...или же использовать квантовые эффекты непосредственно для создания нелинейных микроэлектронных приборов
- Резонансы — внутренние частоты собственных колебаний физической системы
- В окрестности резонанса линейное изменение внешней частоты колебаний влечет нелинейный отклик
  - В применении к квантовому волноводу: линейное изменение геометрии волновода нелинейно меняет коэффициент прохождения

Использование квантовых точек для получения нелинейных эффектов

- Добавление дефектов/резонаторов в структуру волновода позволяет получить резонансные эффекты
- Резонатор физически реализуется квантовой точкой
  - Квантовые точки — «контролируемые дефекты»
  - Можно менять размер, например, внешним электрическим полем
  - Современные технологии позволяют изготавливать точки размером 2-10 нм
- Регулируя параметры квантовой точки в окрестности резонанса, можно получать нелинейный эффект

Модель волновода

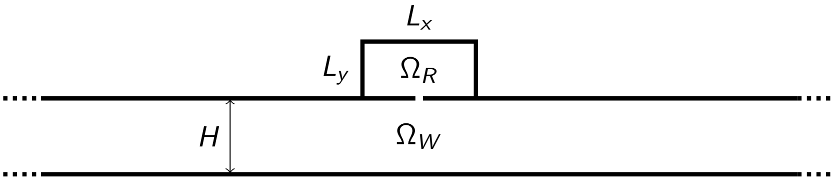

Рис. 1 : Модель волновода с резонатором Гельмгольца

Постановка математической задачи

- Стационарное уравнение Шредингера: $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$
- Аналитически:
  - не решается (трансцендентные уравнения для собственных чисел в простейшей модели одномерного прямоугольного барьера)
- Численно:
  - долго
  - домен задачи бесконечен
  - задача Коши для эллиптического уравнения в двумерной области некорректна
  - не ясно, как выбрать граничные условия

Точечные взаимодействия: основная идея

- Заменим конечное отверстие на точечное, получаем *аппроксимацию* модели с конечным отверстием моделью с отверстием нулевого радиуса
- Модель с точечным отверстием допускает аналитические решения

Самосопряженные расширения (1)

- Сузим область определения оператора Лапласа Δ до функций, зануляющихся в окрестности точечного отверстия
  - $\Delta_0 = \Delta_{0W} \oplus \Delta_{0R}$
    - Симметрический оператор: формально $\Delta_0 = \Delta_0^*$
    - Но не обязательно самосопряжённый: $\operatorname{dom} \Delta_0 \neq \operatorname{dom} \Delta_0^*$
- Нет взаимодействия между областями, надо его «включить». Математически — расширить оператор Δ_0 до самосопряжённого Δ_E
- Так как $\operatorname{dom} \Delta_0 \subseteq \operatorname{dom} \Delta_0^*$, вместо расширения домена исходного оператора можно сужать домен сопряженного: $\operatorname{dom} \Delta_0 \subseteq \operatorname{dom} \Delta_E = \operatorname{dom} \Delta_E^* \subseteq \operatorname{dom} \Delta_0^*$

Самосопряженные расширения (2)

- Домен сопряженного оператора:

$$\operatorname{dom} \Delta^*_{0W,0R} = \sum_{i=0}^{\infty} C_i S^i \frac{\partial^i}{\partial n^i} G_{W,R}(x, y, x_0, y_0; k_0) + u_{W,R}(x, y)$$

  , где S — ширина отверстия, $C_i \in \mathbb{C}$, k_0 — некоторое регулярное волновое число, $u_{W,R}$ — дважды дифференцируемая функция, зануляющаяся в окрестности отверстия

- Условие самосопряженности — зануление формы:
  $\forall f, g \in \operatorname{dom} \Delta_E : J(f, g) = \langle \Delta_E f | g \rangle - \langle f | \Delta^*_E g \rangle$

Необходимость расширения пространства при условии Дирихле

- Условие на ноль волновой функции: $\psi\big|_{\Gamma_W} = 0,\ \psi\big|_{\Gamma_R} = 0$
  - Является физически обоснованным: частица имеет нулевую вероятность оказаться за пределами волновода
- Но Δ не имеет расширений в $L^2(\Omega)$:
  - Функции Грина имеют те же граничные условия, поэтому $G(x, y, x_0, y_0; k_0) = 0$
  - В качестве дополнительных элементов формально подходят производные функции Грина $\frac{\partial G(x,y,x_0,y_0;k_0)}{\partial n}$, но они не лежат в $L^2(\Omega)$!
- Необходим выход в более широкое, чем $L^2(\Omega)$, пространство, в котором и будет строиться расширение

Расширение оператора в понтрягинском пространстве (1)

- Строим пространство $\Pi = \mathcal{H}_0 \oplus \mathbb{C}^m \oplus \mathbb{C}^m$, с индефинитным скалярным произведением $[\cdot,\cdot]_\Pi$, оно расширяет $(\mathcal{H}_0, \langle\cdot|\cdot\rangle_0)$
- Теперь расширение строится в пространстве Π
  - Этому пространству может быть дана физическая интерпретация
- Оператор Δ_0 в Π все еще симметрический, но теперь у него есть самосопряженные расширения

Расширение оператора в понтрягинском пространстве (2)

- Домен сопряженного оператора:

$$\operatorname{dom}\Delta_0^* = \begin{cases} a_R \frac{\partial G_R}{\partial n}(x, y, x_0, y_0; k_0) + u_R(x, y) & ,(x, y) \in \Omega_R \\ a_W \frac{\partial G_W}{\partial n}(x, y, x_0, y_0; k_0) + u_W(x, y) & ,(x, y) \in \Omega_W \end{cases}$$

- Выбираем подмножество, на котором зануляется граничная форма $J = [\Delta_E f, g]_\Pi - [f, \Delta_E^* g]_\Pi$
- Получаем асимптотические ограничения на элементы домена самосопряженного расширения

Результаты

- Получено решение уравнения Шредингера в явном виде:

$$\psi(x,y) = \begin{cases} \alpha_R \frac{\partial G_R}{\partial n}(x,y,x_0,y_0;k) & ,(x,y)\in\Omega_R \\ \alpha_W \frac{\partial G_W}{\partial n}(x,y,x_0,y_0;k) + \psi_{inc}(x,y) & ,(x,y)\in\Omega_W \end{cases}$$

- В аналитическом виде получена зависимость коэффициента прохождения от параметров волновода и энергии

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

- Обнаружены резонансы
- Рассчитана зависимость коэффициента прохождения от энергии
- Рассчитана зависимость коэффициента прохождения от геометрии резонатора

Результаты: коэффициент прохождения

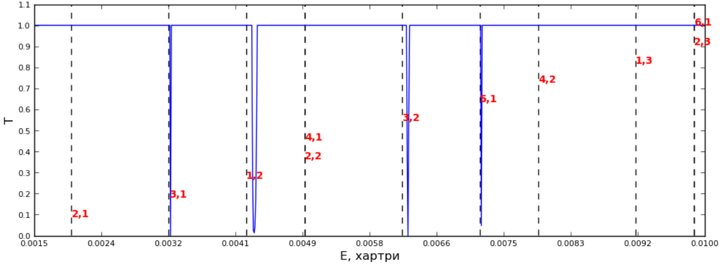

Рис. 2 : Зависимость коэффициента прохождения от энергии входящей волны. Вертикальные пунктирные линии — собственные энергии резонатора, парами чисел помечены номера соответствующих им собственных состояний.

Результаты: плотность вероятности в резонансной точке

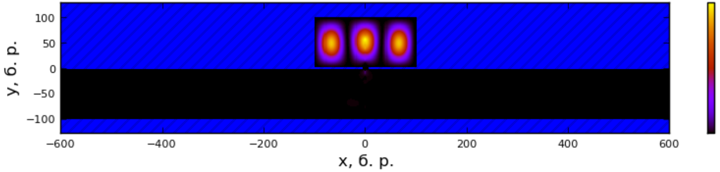

Рис. 3 : Плотность вероятности в резонансной точке

Результаты: плотность вероятности в окрестности резонансной точки

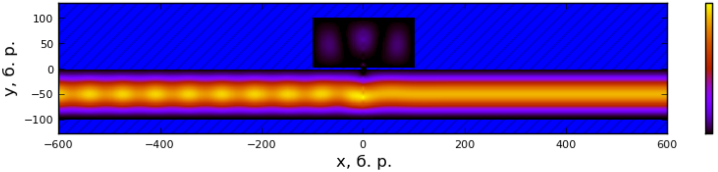

Рис. 4 : Плотность вероятности в небольшой окрестности резонансной точки

Результаты: коэффициент прохождения в окрестности резонанса

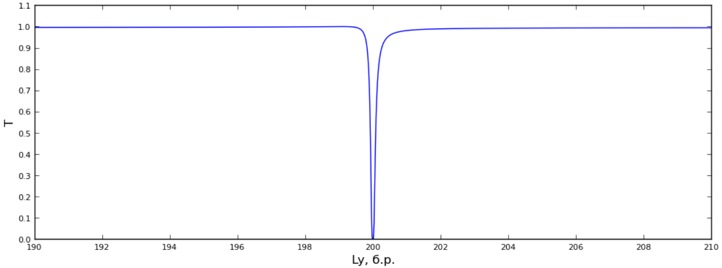

Рис. 5 : Зависимость коэффициента прохождения от геометрии резонатора

Дальнейшие вариации задачи

- Двумерный волновод, квантовая точка внутри проводника
- Трехмерный волновод, квантовая точка внутри проводника
- Трехмерный волновод, тороидальный резонатор Гельмгольца
  - Взаимодействие не точечное, но за счет симметрии может получиться что-то хорошее
- Полупрозрачная перегородка
- Уравнение Дирака
  - Учитывает релятивистские эффекты
- Магнитное поле