

Логический элемент NOT в двумерном электронном волноводе

© Д.Е. Цуриков, А.М. Яфясов

Санкт-Петербургский государственный университет,
198504 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: DavydTsurikov@mail.ru

(Поступило в Редакцию 8 февраля 2011 г.)

Предложена теоретическая модель логического элемента NOT на базе двумерного электронного волновода. Приведены результаты оптимизации параметров геометрии и внешнего электрического поля для достижения максимальной эффективности работы прибора.

Актуальной задачей современной наноэлектроники является применение квантовых эффектов для построения логических элементов вычислительной техники [1]. Как правило, основой подобных элементов является двухуровневая система. Для ее реализации можно использовать эффекты размерного квантования в полупроводниковых структурах. В настоящей работе предложена теоретическая модель логического элемента NOT в двумерном электронном волноводе.

Рассмотрим задачу рассеяния электрона в двумерном волноводе, к участку которого приложено однородное электрическое поле (рис. 1). Движение электрона в полупроводнике описывается уравнением Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(X, Y) \right] \varphi(X, Y) = E\varphi(X, Y),$$

$$\{X, Y\} \in (-\infty, +\infty) \times (0, B), \quad (1)$$

где \hbar — постоянная Планка, m_e — эффективная масса электрона, Δ — оператор Лапласа, $V(X, Y) = e_0 \mathcal{E}_Y Y \theta(X) \theta(A - X)$ — потенциал, e_0 — элементарный заряд, \mathcal{E}_Y — проекция напряженности внешнего электрического поля на ось Y , E — энергия электрона.

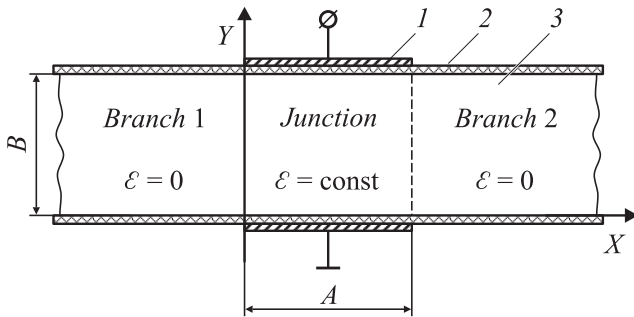


Рис. 1. Конструкция логического элемента NOT в двумерном электронном волноводе: 1 — металл, 2 — диэлектрик, 3 — полупроводник. В силу симметрии прибор одинаково влияет на электроны, движущиеся как слева направо, так и справа налево.

Вводя обозначения

$$x := \frac{X}{B}, \quad y := \frac{Y}{B}, \quad a := \frac{A}{B},$$

$$\Psi(x, y) := B\varphi(Bx, By), \quad \alpha := \frac{2m_e B^2 e_0}{\hbar^2} \mathcal{E}_Y,$$

$$\varepsilon := \frac{2m_e B^2}{\hbar^2} E, \quad (2)$$

безразмерную задачу в узле (в рассеивающем участке волновода) с учетом условий сшивания волновой функции с функциями в рукавах (в участках волновода, примыкающих к узлу) можно записать в виде [2]

$$\begin{cases} [-\partial_x^2 - \partial_y^2 + \alpha y] \times \\ \times \Psi^\circ(x, y) = \varepsilon \Psi^\circ(x, y), \quad \{x, y\} \in (0, a) \times (0, 1), \\ \Psi^\circ(x, 0) = \Psi^\circ(x, 1) = 0, \quad x \in (0, a), \\ (K + i\partial_1)W\Psi^\circ(0, y) = 2K\psi^a(0, y), \quad y \in (0, 1), \end{cases} \quad (3)$$

где ∂_1 — оператор дифференцирования функции по первому аргументу. Здесь условия на границах узла с рукавами заданы в локальных системах координат (ЛСК) [2]:

$$W^1 \Psi^\circ(x, y) = \Psi^\circ(-x, y),$$

$$W^2 \Psi^\circ(x, y) = \Psi^\circ(x + a, y).$$

Это удобно, так как по определению в ЛСК оси абсцисс направлены от узла, а волны, падающие на узел из k -рукава, и волны, рассеянные узлом в k -рукав, можно записать в компактном виде

$$\psi^{<k}(x, y) := \sum_{m=1}^{\infty} c_m^{<k} [\exp(-iKx)h(y)]_m^k$$

и

$$\psi^{>k}(x, y) := \sum_{m=1}^{\infty} c_m^{>k} [\exp(+iKx)h(y)]_m^k,$$

соответственно $k = 1, 2$. В задаче (3) также используются обозначения

$$K^{kq} := I^{kq} \sum_{m=1}^{\infty} |h_m^k\rangle \kappa_m^k \langle h_m^k|, \quad \kappa_m^k := \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_{\perp m}^k}, \quad \varepsilon_{\perp m}^k = (\pi m)^2,$$

$$h_m^k(y) = \sqrt{2} \sin(\pi m y), \quad k, q = 1, 2, \quad m \in \mathbb{N}, \quad (4)$$

где I — единичная матрица, $\varepsilon_{\perp m}^k$ — энергия размерного квантования в k рукаве (энергия канала). Так как в этой задаче рукава одинаковы, далее также будут использоваться сокращенные обозначения: $h_m := h_m^1 = h_m^2$ и $\varepsilon_{\perp m} := \varepsilon_{\perp m}^1 = \varepsilon_{\perp m}^2$.

Для волн, рассеянных узлом, из условий сшивания можно записать соотношение

$$\psi^{\triangleright}(0, y) = W\Psi^{\circ}(0, y) - \psi^{\triangleleft}(0, y), \quad y \in (0, 1). \quad (5)$$

Известно, что расширенная матрица рассеяния S связывает амплитуды волн, рассеянных узлом, $c_m^{\triangleright k}$ с амплитудами волн, падающих на узел, $c_m^{\triangleleft k}$ [3]:

$$c^{\triangleright} = S c^{\triangleleft}. \quad (6)$$

Решив задачу (3), с учетом (4)–(6) можно найти S -матрицу узла

$$S = G^{\circ} [iKG^{\circ} - \partial_1 G^{\circ}]^{-1}(0) i2K - I,$$

$$G_{nm}^{\circ}(x) := \langle h_n | h_m^{\circ} \rangle \begin{bmatrix} \exp(-\kappa_m^{\circ} x) & \exp(+\kappa_m^{\circ} x) \\ \exp(+\kappa_m^{\circ} [x+a]) & \exp(-\kappa_m^{\circ} [x+a]) \end{bmatrix} \quad (7)$$

где $n \in \mathbb{N}$, $\kappa_m^{\circ} := \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_{\perp m}^{\circ}}$, $\varepsilon_{\perp m}^{\circ}$ и h_m° — собственные значения и нормированные собственные функции, соответственно задачи вида

$$\begin{cases} [-\partial_y^2 + \alpha y] h^{\circ}(y) = \varepsilon_{\perp}^{\circ} h^{\circ}(y), & y \in (0, 1), \\ h^{\circ}(0) = h^{\circ}(1) = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Решением задачи (8) является линейная комбинация функции Эйри

$$h^{\circ}(y) = c^{\circ 1} \text{Ai}\left(\frac{\alpha y - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) + c^{\circ 2} \text{Bi}\left(\frac{\alpha y - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right). \quad (9)$$

Используя граничные условия в (8), из (9) имеем

$$\begin{bmatrix} \text{Ai}\left(\frac{-\varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) & \text{Bi}\left(\frac{-\varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) \\ \text{Ai}\left(\frac{\alpha - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) & \text{Bi}\left(\frac{\alpha - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^{\circ 1} \\ c^{\circ 2} \end{bmatrix} = 0. \quad (10)$$

Уравнение (10) позволяет вычислить неизвестные коэффициенты в (9), а условие его разрешимости даст уравнение на $\varepsilon_{\perp}^{\circ}$

$$\text{Ai}\left(\frac{-\varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) \text{Bi}\left(\frac{\alpha - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) = \text{Bi}\left(\frac{-\varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right) \text{Ai}\left(\frac{\alpha - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{\alpha^{2/3}}\right). \quad (11)$$

Таким образом, решив (10), (11) и нормировав функцию (9), можно найти значения элементов матрицы рассеяния (7).

Для расчета транспортных свойств узла необходимо найти связь между падающими и рассеянными потоками. Введем безразмерные потоки в каналах следующим

образом:

$$i_m^{\triangleleft k} := \frac{i}{2} \int_0^1 dy [\psi_m^{\triangleleft k} \partial_1 \bar{\psi}_m^{\triangleleft k} - \bar{\psi}_m^{\triangleleft k} \partial_1 \psi_m^{\triangleleft k}],$$

$$i_m^{\triangleright k} := \frac{i}{2} \int_0^1 dy [\psi_m^{\triangleright k} \partial_1 \bar{\psi}_m^{\triangleright k} - \bar{\psi}_m^{\triangleright k} \partial_1 \psi_m^{\triangleright k}], \quad (12)$$

где $i_m^{\triangleleft k}$ и $i_m^{\triangleright k}$ — падающий и рассеянный электронные потоки соответственно в m -канале k -рукава, а черта над волновыми функциями означает комплексное сопряжение. Из (12) можно получить выражения вида

$$i_m^{\triangleleft k} = \begin{cases} -\kappa_m^k |c_m^{\triangleleft k}|^2, & m \in \mathbb{O}, \\ 0, & m \notin \mathbb{O}, \end{cases}$$

$$i_m^{\triangleright k} = \begin{cases} +\kappa_m^k |c_m^{\triangleright k}|^2, & m \in \mathbb{O}, \\ 0, & m \notin \mathbb{O}, \end{cases} \quad (13)$$

где $\mathbb{O} := \{m | \varepsilon_{\perp m} < \varepsilon\}$ — номера открытых каналов. С учетом выражений (6) и (13) запишем

$$i_m^{\triangleright k} = \begin{cases} [C d^{\triangleleft}]_{m}^{*k} [C d^{\triangleleft}]_{m}^k, & m \in \mathbb{O}, \\ 0, & m \notin \mathbb{O}, \end{cases} \quad (14)$$

где $C := K^{+1/2} S K^{-1/2}$ — потоковая матрица рассеяния, $d^{\triangleleft} := K^{1/2} c^{\triangleleft}$. Согласно условию сохранения полного потока

$$0 = i^{\triangleright} + i^{\triangleleft}, \quad i^{\triangleleft} = \sum_{m \in \mathbb{O}} \sum_{k \in \{1,2\}} i_m^{\triangleleft k}, \quad i^{\triangleright} = \sum_{m \in \mathbb{O}} \sum_{k \in \{1,2\}} i_m^{\triangleright k}, \quad (15)$$

имеем следующее условие унитарности:

$$C_{++}^{\dagger} C_{++} = I_{++} = C_{++} C_{++}^{\dagger}, \quad (16)$$

где

$$C_{++} := \{C_{mn}^{kq}\}_{m,n \in \mathbb{O}}^{k,q \in \{1,2\}}$$

— блок потоковой матрицы рассеяния, отвечающий открытым каналам

$$I_{++} := \{I_{mn}^{kq}\}_{m,n \in \mathbb{O}}^{k,q \in \{1,2\}}.$$

Согласно свойству (16), квадраты модулей элементов матрицы C_{++} имеют вероятностную интерпретацию.

Рассмотрим диапазон энергий электрона, соответствующий двум открытым каналам: $\varepsilon \in (\varepsilon_{\perp 2}, \varepsilon_{\perp 3})$, $\mathbb{O} = \{1, 2\}$. Пусть электрон падает на узел, находясь только в первом канале первого рукава $i_m^{\triangleleft k} = I_{1m}^{1k}$. Найдём поток во втором канале второго рукава. Согласно (13) и (14), он запишется в виде

$$i_2^{\triangleright 2} = -P i_1^{\triangleleft 1}, \quad P := |C_{21}^{21}|^2, \quad (17)$$

где P — вероятность того, что электрон пройдет сквозь узел, изменив канал. Ассоциируем ток в первом канале

Параметры квантового логического элемента NOT ($T = 300$ K)

$\Delta E/k_0T$	InP			GaAs			GaSb		
	A, nm	B, nm	\mathcal{E} , V/m	A, nm	B, nm	\mathcal{E} , V/m	A, nm	B, nm	\mathcal{E} , V/m
1	7.5	17	$5.7 \cdot 10^7$	8.5	19	$5.0 \cdot 10^7$	10.5	23	$4.1 \cdot 10^7$
2	5.3	12	$1.6 \cdot 10^8$	6.0	13	$1.4 \cdot 10^8$	7.4	16	$1.1 \cdot 10^8$
3	4.3	9.6	$2.9 \cdot 10^8$	4.9	11	$2.6 \cdot 10^8$	6.1	13	$2.1 \cdot 10^8$

с логическим нулем („0“), а ток во втором канале — с логической единицей („1“). В силу симметрии задачи $|C_{21}^1|^2 = |C_{12}^2|^2$. Тогда величину P можно интерпретировать, как эффективность работы узла в качестве квантового логического элемента NOT (рис. 2).

Для наилучшей работы прибора величина P должна иметь максимальное значение, то есть, согласно (16), значение, близкое к единице. Для достижения этого оптимизируем параметры задачи (3): ε , α , a . В качестве примера рассмотрим следующие диапазоны:

$$\varepsilon \in (\varepsilon_{\perp 2}, \varepsilon_{\perp 3}), \quad \alpha \in [-700, -100], \quad a \in [0.1, 1.5].$$

В результате расчетов был найден набор параметров, отвечающих локальному максимуму функции P . Зафиксируем значения α и a , построим график вероятности P как функции энергии ε (рис. 3).

Из рис. 3 видно, что найденные значения параметров обеспечивают эффективность работы квантового логического элемента NOT, близкую к 100%. Так как важной характеристикой прибора также является рабочий диапазон энергий электрона, обозначим за $\Delta\varepsilon$ ширину пика на уровне $P = 0.9$. В данном случае $\Delta\varepsilon = 15$.

Для оценки параметров прибора в случае конкретных материалов следует перейти от безразмерной задачи к размерной. Найдем длину и ширину узла, а также величину внешнего электрического поля на основе проведенных расчетов, зафиксировав размерный рабочий диапазон энергий ΔE . Согласно (2), получим

$$A = aB, \quad B = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\Delta\varepsilon}{\Delta E}}, \quad \mathcal{E} = \frac{\sqrt{2m_e}}{e_0\hbar} \left(\frac{\Delta E}{\Delta\varepsilon} \right)^{3/2} |\alpha|. \quad (18)$$

Рассчитаем параметры прибора (18) для трех различных материалов: InP ($m_e = 0.080m_0$), GaAs ($m_e = 0.063m_0$), GaSb ($m_e = 0.041m_0$) [4]. Рассмотрим значения ΔE , кратные характерной величине теплового размытия энергии электрона k_0T .

Как видно из таблицы, высокая ($> 90\%$) эффективность работы логического элемента NOT для рассмотренных материалов при комнатной температуре достижима при ширине волновода, существенно превосходящей атомные размеры. Это важно как с технологической точки зрения, так и с точки зрения использованной в расчетах модели, основанной на зонной теории твердого тела. Значения электрического поля также можно считать допустимыми, не разрушающими материал.

Таким образом, в настоящей работе предложена теоретическая модель логического элемента NOT на базе двумерного электронного волновода. На примере InP, GaAs и GaSb показано, что высокая ($> 90\%$) эффективность работы прибора при комнатной температуре достижима при напряженности поля $\mathcal{E} \approx 10^7 - 10^8$ V/m и ширине волновода $B \sim 10^{-8}$ м. Расчеты показали, что для реализации устройства на основе полупроводников с параболическим законом дисперсии предпочтительны

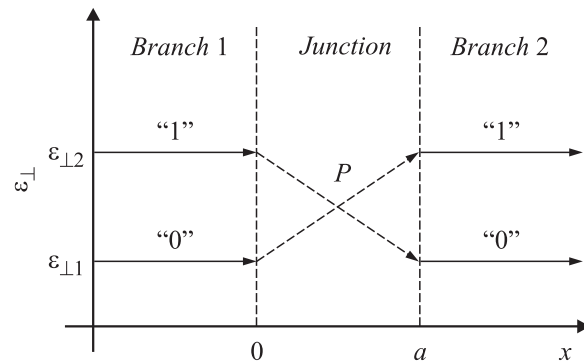


Рис. 2. Схема работы логического элемента NOT в двумерном электронном волноводе: преобразование „0“ в „1“ и „1“ в „0“. Сплошные линии — энергии каналов $\varepsilon_{\perp 1}$ и $\varepsilon_{\perp 2}$, стрелки на них указывают направление электронного потока в каналах. Штриховые линии и стрелки на них иллюстрируют принцип работы прибора: смена электроном канала с вероятностью P при упрямом рассеянии в узле.

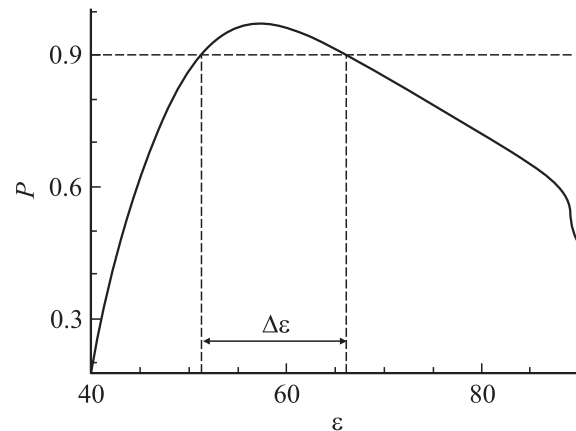


Рис. 3. Эффективность работы логического элемента NOT: $\alpha = -547$, $a = 0.452$, $\varepsilon_{\max} = 57.3$, $P_{\max} = 0.971$, $\Delta\varepsilon = 15$.

ми являются материалы с малой эффективной массой носителей заряда.

Список литературы

- [1] *Nielsen M.A., Chung I.L.* Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, 2000.
- [2] *Цуриков Д.Е., Яфясов А.М.* // Вестн. СПбГУ. Сер. 4. 2010. Вып. 1. С. 153–157.
- [3] *Ньютон Р.* // Теория рассеяния волн и частиц. Пер. с англ. М.: Мир, 1969.
- [4] *Levinshtein M., Romyatsev S., Shur M.* Handbook series on Semiconductor Parameters. World Scientific. Singapore–New Jersey–London–Hong Kong, 1999. V. 2. 205 p.