УДК 517.9


# МОДЕЛЬ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ КАК РЕЗОНАТОРА С ПОЛУПРОЗРАЧНОЙ ГРАНИЦЕЙ

*И.Ю.Попов*

Построена модель квантовой точки как резонатора с полупрозрачной границей, основанная на теории расширений симметрических операторов. Найдены коэффициент прохождения и проводимость.

В современной теоретической наноэлектронике видное место занимает задача описания мезоскопических структур, которая часто сводится к задаче распространения электронной волны по квантовому волноводу. В рамках указанного подхода в последнее время было описано (и даже предсказано) много интересных эффектов в наноструктурах [1–4]. Следует, однако, подчеркнуть, что описание нетривиальной волноводной структуры является трудной задачей. Поэтому чрезвычайно полезно создание моделей, позволяющих эффективно описывать эти системы. Одна из таких моделей и предлагается в данной статье. Она основана на теории самосопряженных расширений симметрических операторов и аналогична известному методу потенциалов нулевого радиуса [5,6] и модели щелей нулевой ширины в теории дифракции [7–9].

Структура модели такова. Пусть $\Omega^{\text{in}}$ — область в $R^3$ с гладкой границей $\partial\Omega$, $\Omega^{\text{ex}} = R^3 \backslash \Omega^{\text{in}}$, $x_0 \in \partial\Omega$. Рассмотрим $-\Delta = -(\Delta^{\text{in}} \oplus \Delta^{\text{ex}})$, где $\Delta^{\text{in}}$, $\Delta^{\text{ex}}$ — операторы Лапласа с условиями Неймана на границе в $\Omega^{\text{in}}$, $\Omega^{\text{ex}}$. Сузим этот оператор на множество гладких функций, обращающихся в нуль в точке $x_0$. Замыкание $\Delta_0$ этого сужения есть симметрический оператор с индексами дефекта (2,2). Он имеет самосопряженные расширения, которые и дают модель. В [8] показано, что можно выбрать параметры расширения таким образом, что его функция Грина совпадает с главным членом асимптотики «реальной» функции Грина для препятствия с малым отверстием (при стремлении к нулю радиуса отверстия). Эта модель оказалась полезной для расчета наноэлектронных систем [9]. В настоящей работе мы строим модель квантовой точки на базе теории расширений операторов.

Пусть $\Delta_0^{\text{in}}$, $\Delta_0^{\text{ex}}$ — операторы Лапласа в $\Omega^{\text{in}}$, $\Omega^{\text{ex}}$, определенные на множествах гладких функций, равных нулю на поверхности $\partial\Omega$. Оператор $-\Delta_0 = -(\Delta_0^{\text{in}} \oplus \Delta_0^{\text{ex}})$ симметричен и имеет бесконечные индексы дефекта. Область определения его самосопряженного расширения состоит из элементов $u(v)$ из области определения сопряженного оператора, для которых выполнено условие

$$\int\limits_{\partial\Omega^{\text{in}}} \left(\frac{\partial u}{\partial n}\bar{v} - u\frac{\partial \bar{v}}{\partial n}\right) ds - \int\limits_{\partial\Omega^{\text{ex}}} \left(\frac{\partial u}{\partial n}\bar{v} - u\frac{\partial \bar{v}}{\partial n}\right) ds = 0.$$

Здесь $n$ — внешняя нормаль. Мы не будем здесь описывать все возможные расширения [10], а рассмотрим лишь одно, которое выделяется следующим условием связи предельных значений функций и их производных на границе:

$$u|_{\text{in}} = u|_{\text{ex}}, \qquad \left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_{\text{ex}} - \left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_{\text{in}} = \beta u|_{\text{in}}. \tag{1}$$

Указанный оператор и дает требуемую модель.

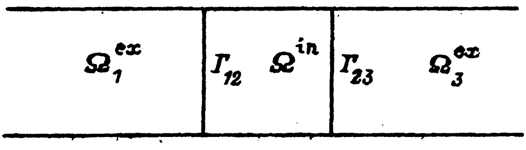
Рассмотрим мезоскопическую структуру (см. рисунок). Будем иметь дело одновременно с двумерной и трехмерной задачами. В первой волноводы будут полубесконечными полосами, во второй — круговыми цилиндрами. Будем предполагать, что общая часть $\Gamma = \Gamma_{12}$ и $\Gamma_{23}$ границы волноводов и квантовой точки (резонатора) полупрозрачна, а на остальной части границы выполнено условие Дирихле. Используем описанную выше модель. Решение задачи рассеяния для модельного оператора ищем в виде

$$u(x,k) = \begin{cases} \tilde{u}(x,k) + \int\limits_{\Gamma_{12}} G_1^{\text{ex}}(x,s,k)\phi_{12}^{\text{ex}}(s)\,ds, & x \in \Omega_1^{\text{ex}}, \\ \int\limits_{\Gamma_{12}} G^{\text{in}}(x,s,k)\phi_{12}^{\text{in}}(s)\,ds + \int\limits_{\Gamma_{23}} G^{\text{in}}(x,s,k)\phi_{23}^{\text{in}}(s)\,ds, & x \in \Omega^{\text{in}}, \\ \int\limits_{\Gamma_{23}} G_3^{\text{ex}}(x,s,k)\phi_{23}^{\text{ex}}(s)\,ds, & x \in \Omega_3^{\text{ex}}. \end{cases} \tag{2}$$

Здесь $\tilde{u}(x,k) = u_N(x,k)$ ($u_{NJ}$ в трехмерном случае) — падающая волна (мы фиксируем некоторую моду); $G^{\text{in}}(x,s,k)$, $G_{1,3}^{\text{ex}}(x,x_0,k)$ — функции Грина для резонатора и волноводов $\Omega_{1,3}$ соответственно.

Условия (1), выделяющие выбранное нами расширение, приводят к следующей системе интегральных уравнений для функций $\phi_{12}^{\text{in,ex}}$, $\phi_{23}^{\text{in,ex}}$ (параметр $\beta$ считаем различным на $\Gamma_{12}$ и $\Gamma_{23}$)

$$\tilde{u}(x,k) + \int\limits_{\Gamma_{12}} G_1^{\text{ex}}(x,s,k)\phi_{12}^{\text{ex}}(s)\,ds =$$




Геометрия системы.

$\Omega^{\text{in}}$ — **квантовая точка;** $\Omega_{1,3}^{\text{ex}}$ — **квантовые волноводы;** $\Gamma_{12}$, $\Gamma_{23}$ — **полупрозрачные границы.**

$$= \int\limits_{\Gamma_{12}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{12}^{\rm in}(s)\,ds + \int\limits_{\Gamma_{23}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{23}^{\rm in}(s)\,ds\Big|_{\Gamma_{12}},$$

$$\phi_{12}^{\rm in}(x)+\phi_{12}^{\rm ex}(x) = \beta_{12}\Big(\int\limits_{\Gamma_{12}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{12}^{\rm in}(s)\,ds + \int\limits_{\Gamma_{23}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{23}^{\rm in}(s)\,ds\Big|_{\Gamma_{12}}\Big),$$

$$\int\limits_{\Gamma_{23}} G_3^{\rm ex}(x,s,k)\phi_{23}^{\rm ex}(s)\,ds = \int\limits_{\Gamma_{23}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{23}^{\rm in}(s)\,ds + \int\limits_{\Gamma_{12}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{12}^{\rm in}(s)\,ds\Big|_{\Gamma_{23}},$$

$$\phi_{23}^{\rm in}(x)+\phi_{23}^{\rm ex}(x) = \beta_{23}\Big(\int\limits_{\Gamma_{12}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{12}^{\rm in}(s)\,ds + \int\limits_{\Gamma_{23}} G^{\rm in}(x,s,k)\phi_{23}^{\rm in}(s)\,ds\Big|_{\Gamma_{23}}\Big). \tag{3}$$

Будем рассматривать далее только ситуацию, когда поперечные размеры волноводов и резонатора совпадают (что существенно упрощает ситуацию). Функции будем искать в виде рядов

$$\phi_{12,23}^{\rm in}(x) = \sum_n c_n^{12,23}\psi_n(x), \quad \phi_{12,23}^{\rm ex}(x) = \sum_n d_n^{12,23}\psi_n(x), \tag{4}$$

где $\psi_n(x)$ — собственные функции задачи Дирихле в $\Gamma_{12,23}$.

Воспользуемся известным представлением для функций Грина

$$G^{\rm ex}(x,Y,x^*,Y^*,k) = \sum_{n=0}^{\infty}(2p_n)^{-1}\psi_n(Y)\psi_n(Y^*)e^{-p_n|x-x^*|},$$

$$G_{1,3}^{\rm ex}(x,Y,x^*,Y^*,k) = G^{\rm ex}(x,Y,x^*,Y^*,k) + G^{\rm ex}(x,Y,x_{1,3}^*,Y_{1,3}^*,k),$$

где $(x_{1,3}^*,\ Y_{1,3}^*)$ — точки, симметричные точкам $(x,Y)$ относительно плоскостей $x=x_{12}$, $x=x_{23}$ соответственно; $x$ — декартова координата вдоль волновода; $Y$ — декартова координата точки в двумерном случае или совокупность полярных координат $(\rho,\phi)$ в трехмерном случае,

$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{h^{-1}}\sin(\pi\,n\,y\,h^{-1}), & \text{двумерный случай,}\\ \alpha_{mn}J_n(\mu_{mn}a^{-1}\rho)^{\cos}_{\sin}(n\,\phi), & \text{трехмерный случай,}\end{cases}$$

$$\alpha_{mn} = \mu_{mn}\sqrt{(\pi\,a^2(\mu_{mn}^2-n^2))^{-1}}(|J_n(\mu_{mn})|)^{-1},$$

$\mu_{mn}$ — $m$-й корень уравнения $J_n(\mu_{mn})=0$,

$$p_n = \begin{cases} \sqrt{(\pi\,n\,h^{-1})^2-k^2}, & (\pi\,n\,h^{-1})^2 > k^2,\\ i\sqrt{k^2-(\pi\,n\,h^{-1})^2}, & (\pi\,n\,h^{-1})^2 < k^2.\end{cases}$$

*Замечание.* В трехмерном случае функция $\psi_n$ зависит в действительности от двух индексов $\psi_{nm}$.

Для функции Грина резонатора используем представление

$$G^{\text{in}}(x,\rho,\phi,x^*,\rho^*,\phi^*,k)=\sum_{m,j,n}\frac{v_{nmj}(x,\rho,\phi)v_{nmj}(x^*,\rho^*,\phi^*)}{L(\lambda-\lambda_{nmj})},$$

где (в трехмерном случае)

$$v_{nmj}(x,\rho,\phi)=\psi_{nj}(\rho,\phi)\cos(m\,\pi\,x\,L^{-1}),$$

$$\lambda_{nmj}=(\pi\,m\,L^{-1})^2+\mu_{nj}^2R^{-2},\quad k^2=\lambda.$$

Следовательно, следы функции Грина на поверхностях $\Gamma_{12,23}$ имеют вид

$$G^{\text{in}}(x,s,k)=\sum_n g_{nj}\psi_{nj}(x)\psi_{nj}(s),\qquad x,s\in\Gamma_{23,12},$$

$$G^{\text{in}}(x,s,k,)=\sum_n g_{nj}^L\psi_{nj}(x)\psi_{nj}(s),\qquad x\in\Gamma_{23,12},s\in\Gamma_{12,23}.$$

Здесь

$$g_{nj}=\frac{\mu_{jn}}{\sqrt{(\pi\,a^2(\mu_{jn}^2-n^2))}|J_n(\mu_{jn})|}\sum_{m=0}^{\infty}(\lambda-\lambda_{nmj})^{-1},\tag{5}$$

$$g_{nj}^L=\frac{\mu_{jn}}{\sqrt{(\pi\,a^2(\mu_{jn}^2-n^2))}|J_n(\mu_{jn})|}\sum_{m=0}^{\infty}(\lambda-\lambda_{nmj})^{-1}\cos(\pi\,m).\tag{6}$$

Подставляя данные выражения в (3), получаем следующую систему линейных алгебраических уравнений для коэффициентов рядов (4):

$$\delta_{Nn}\delta_{Jj}+(2p_n)^{-1}d_{nj}^{12}=g_{nj}c_{nj}^{12}+g_{nj}^Lc_{nj}^{23},$$

$$d_{nj}^{12}+c_{nj}^{12}=\beta_{12}(g_{nj}c_{nj}^{12}+g_{nj}^Lc_{nj}^{23}),$$

$$(2p_n)^{-1}d_{nj}^{23}=g_{nj}^Lc_{nj}^{12}+g_{nj}c_{nj}^{23},$$

$$d_{nj}^{23}+c_{nj}^{23}=\beta_{23}(g_{nj}^Lc_{nj}^{12}+g_{nj}c_{nj}^{23}).$$

(Здесь использовано предположение, что $\tilde{u}(x,k)=u_{NJ}(x,k)$).

Определитель этой системы в общем случае отличен от нуля. Тогда решение имеет вид

$$d_{nj}^{12,23}=c_{nj}^{12,23}=0,\quad n\neq N,\quad j\neq J,$$

$$d_{NJ}^{23}=-\Xi^{-1}\Big(g_{NJ}^L(1-\beta_{12}g_{NJ})\left(\beta_{12}(2p_N)^{-1}-1\right)+$$
$$+\beta_{12}g_{NJ}^L\left((\beta_{12}g_{NJ}-1)(2p_N)^{-1}-g_{NJ}\right)\Big),$$

$$d_{NJ}^{12}=\Xi^{-1}\Big((1-\beta_{12}g_{NJ})\left((\beta_{23}g_{NJ}-1)(2p_N)^{-1}-g_{NJ}\right)+$$

$$+\beta_{12}(g^L_{NJ})^2\left(\beta_{23}(2p_N)^{-1}-1\right)\Big),$$

$$\Xi=\left((\beta_{12}g_{NJ}-1)(2p_N)^{-1}-g_{NJ}\right)\left((\beta_{23}g_{NJ}-1)(2p_N)^{-1}-g_{NJ}\right)-$$

$$-\left(\beta_{12}(2p_N)^{-1}-1\right)\left(g^L_{NJ}\right)^2\left(\beta_{23}(2p_N)^{-1}-1\right).$$

Подставляя найденные коэффициенты в выражение (2), получаем решение задачи рассеяния, из которого непосредственно находим коэффициент прохождения $T$ (для данной моды)

$$T=\Xi^{-2}\Big|\Big(g^L_{NJ}(1-\beta_{12}g_{NJ})(\beta_{12}(2p_N)^{-1}-1)+$$

$$+\beta_{12}g^L_{NJ}((\beta_{12}g_{NJ}-1)(2p_N)^{-1}-g_{NJ})\Big)\Big|^2. \tag{7}$$

Выражение для проводимости $\rho$ получается по формуле Ландауэра

$$\rho=e^2h^{-1}T.$$

Здесь учтен только один канал (мода). В случае учета нескольких каналов необходимо использовать многоканальную формулу Ландауэра.

Учитывая (5)–(7), легко заметить, что зависимость проводимости $\rho$ от энергии электрона ($k^2$) имеет резонансный характер вблизи собственных значений замкнутого резонатора $\Omega^{\mathrm{in}}$, что находится в соответствии с экспериментальными результатами [11,12].

## Список литературы


[1] Sols F. // Annals Phys. 1992. V. 214. N 2. P. 386–438.
[2] Kriman A.M., Ruden P.P. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. N 12. P. 8013–8020.
[3] Fong C.Y., Nelson J.C., Hemstreet L.A., Gallup R.F., Chang L.L., Esaki L. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. N 15. P. 9538–9543.
[4] Exner P., Seba P., Stovicek P. // Lect. Notes Phys. 1989. V. 324. P. 257–272.
[5] Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. 240 с.
[6] Павлов Б.С. // УМН. 1987. Т. 42. № 6. С. 99–131.
[7] Popov I.Yu. // J. Math. Phys. 1992. V. 33. N 11. P. 3794–3801.
[8] Popov I.Yu. // Lect. Notes Phys. 1989. V. 324. P. 218–229.
[9] Popov I.Yu., Popova S.L. // Phys. Lett. A. 1993. V. 173. P. 484–488.
[10] Popov I.Yu. // J. Math. Phys. 1992. V. 33. N 5. P. 1685–1689.
[11] Reed M.A., Randell J.N., Aggarwal R.J., Matyi R.J., Moore T.N., Wetsel A.E. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. N 6. P. 535–537.
[12] Su B., Goldman V.J., Santos M., Shayegan M. // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 58. N 7. V. 747–749.



Институт точной механики и оптики
Санкт-Петербург



Поступило в Редакцию
9 ноября 1993 г.