01;06

Квантовые волноводы, связанные через периодическую систему малых отверстий: оценка запрещенной зоны

© О.П. Мельничук, И.Ю. Попов

С.-Петербургский государственный институт точной механики и оптики (технический университет)

Поступило в Редакцию 30 ноября 2001 г.

Вариационным методом показано существование лакуны в спектре оператора Лапласа в двумерных волноводах, связанных через периодическую систему окон.

Развитие наноэлектронной техники привело к необходимости изучения квантовых мезоскопических систем. Анализ баллистического транспорта электрона в подобных системах базируется на спектральных свойствах оператора Шредингера, сводящегося в данном случае к оператору Лапласа. Подобные системы рассматривались многими авторами [1–5]. В настоящей работе изучаются два двумерных волновода, соединенные через периодическую систему малых окон. Аналогичная задача в случае одного окна или конечного числа окон рассматривалась в [4,5]. Там были получены вариационные оценки для собственного значения, появившегося благодаря наличию связи между каналами. Соответствующие асимптотики были найдены в [6–8]. В периодическом случае задача сводится к определению параметров зоны. При этом соответствующее решение должно удовлетворять условию Блоха: $\psi(x + L) = e^{i\theta l}\psi(x)$, где L — период, а θ — квазиимпульс, $-\pi/L \leqslant \theta \leqslant \pi/L$. Для оператора с фиксированным значением квазиимпульса возникает задача на собственные значения λ_{θ_a}. Меняя θ в указанных пределах, получаем параметры зоны. Важно, имеется ли лакуна (запрещенная зона) между данной зоной и непрерывным спектром оператора Лапласа для волновода без отверстия (эта часть спектра при наличии отверстия сохраняется). Для этого мы покажем, что существует такая постоянная δ_a, с которой при всех θ имеет место неравенство $\pi^2 d^{-2} - \lambda_{\theta_a} > \delta_a > 0$.

Пусть двумерные волноводы имеют одинаковые поперечные размеры d. Отверстия связи шириной $2a$, расположены периодически с периодом L. Опишем выбор пробной функции ψ (на одном периоде $[-L/2, L/2]$). Пусть $\psi = F + G$,

$$F_{[-\frac{L}{2},-a]}(x,y) = \alpha V(y)\left\{Ae^{k(x+a)} + Be^{-k(x-a)} + e^{k(x+a)}\right\},$$

$$F_{[a,\frac{L}{2}]}(x,y) = \alpha V(y)\left\{Ae^{k(x+a)} + Be^{-k(x-a)} + e^{-k(x-a)}\right\},$$

$$F_{[-a,a]}(x,y) = \alpha V(y)\left\{1 + Ae^{k(x+a)} + Be^{-k(x-a)}\right\},$$

$$G(x,y) = \sum_{-\infty}^{\infty} \eta\chi_{[Ln-a,Ln+a]} e^{inL\theta} \cos\left(\frac{\pi(x-nL)}{2a}\right) R(y),$$

где

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nL(k-i\theta)}, \quad B = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nL(k+i\theta)}, \quad A = \overline{B},$$

$$R(y) = \begin{cases} e^{-\frac{\pi y}{2a}}, & y \in \left[0, \frac{d}{2}\right], \\ 2\left(1 - \frac{y}{d}\right) e^{-\frac{\pi d}{4a}}, & y \in \left[\frac{d}{2}, d\right], \end{cases}$$

$$V(y) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{\pi y}{d}\right).$$

Здесь α, η и k — некоторые параметры, которые будет выбраны в дальнейшем.

Рассмотрим форму $M(\psi) = (H\psi, \psi) - \frac{\pi^2}{d^2}\|\psi\|^2$, где H — лапласиан Дирихле. Представив операторную часть в виде суммы $\|\psi_x\|^2 + \|\psi_y\|^2$, для выбранной пробной функции получаем:

$$M(\psi) = \|F_x\|^2 + \|G_x\|^2 + \|G_y\|^2$$

$$- \int_{-a}^{a} G(x,0)[\overline{F}_x(x,0) + F_x(x,0)] + \int_{-a}^{a} dx \int_{0}^{d} dy G_x[\overline{F}_x + F_x].$$

При достаточно малых a будут выполняться неравенства

$$\|R\|^2 = \frac{a}{\pi} + \left(\frac{d}{6} - \frac{a}{\pi}\right) e^{-\pi d/2a} < \frac{a}{\pi}(1+\varepsilon),$$

$$\|R'\|^2 = \frac{\pi}{4a} + \left(\frac{2}{d} - \frac{\pi}{4a}\right) e^{-\pi d/2a} < \frac{\pi}{4a}$$

и, следовательно,

$$\|G_x\|^2 + \|G_y\|^2 = \eta^2 \frac{\pi^2}{4a} \|R\|^2 + \eta^2 a \|R'\|^2 < \frac{\pi}{4}(2+\varepsilon)\eta^2.$$

Оценим интегралы в рассматриваемом выражении для $M(\psi)$ следующим образом:

$$\int\limits_{-a}^{a} G(x,0)[\overline{F}_x(x,0) + F_x(x,0)] = \alpha\eta \sqrt{\frac{2}{d}}\,\frac{8a}{d},$$

$$\int\limits_{-a}^{a} dx \int\limits_{0}^{d} dy G_x[\overline{F}_x + F_x] = -\alpha\eta \frac{4a\pi k^2(A+B)}{\pi^2 + 4a^2k^2}\,(e^{2ka}+1) \int\limits_{0}^{d} RV dy,$$

$$\int\limits_{0}^{d} RV dy = \frac{d}{\pi}\sqrt{\frac{2}{d}}\frac{4a^2}{d^2+4a^2} + \frac{2e^{-\frac{\pi d}{4a}}}{\pi}\sqrt{\frac{2}{d}}\,(1-ad) < \frac{d}{\pi}\sqrt{\frac{2}{d}}\frac{4a^2}{d^2+4a^2}(1+\varepsilon_1).$$

Далее, минимизировав по η все слагаемые в $M(\psi)$, кроме $\|F_x\|^2$, получим

$$M(\psi) < \|F_x\|^2 - \alpha^2 \frac{2^7 a^2}{\pi d^3 (2+\varepsilon)}\,(1-\varepsilon_2).$$

Для норм $\|F_x\|^2$ и $\|F\|^2$ можно записать

$$\|F_x\|^2_{[-a,a]} = \alpha^2 k \left(AB(e^{4ka}-1) - 2ake^{2ka}(A^2+B^2)\right),$$

$$\|F_x\|^2_{[a,\frac{L}{2}]} = \frac{\alpha^2 k}{2}\big((1+A+B)(1-e^{-k(L-2a)}) + 2ABe^{2ka}$$
$$\times (\sinh kL - \sinh 2ka) - ke^{2ka}(L-2a)(A^2+B^2+A+B)\big),$$

$$\|F\|^2_{[a,\frac{L}{2}]} = \frac{\alpha^2}{2k}\big((1+A+B)(1-e^{-k(L-2a)}) + 2ABe^{2ka}$$
$$\times (\sinh kL - \sinh 2ka) + ke^{2ka}(L-2a)(A^2+B^2+A+B)\big),$$

$$\|F\|^2_{[-a,a]} = \frac{\alpha^2}{k}\big(2ak + 2(A+B)(e^{2ka}-1) + AB(e^{4ka}-1) + 2ake^{2ka}(A^2+B^2)\big).$$

При достаточно малых k, $M(\psi) < 0$, поэтому для оценки сверху дроби $M(\psi)/\|\psi\|^2$ мы можем увеличивать ее знаменатель и $\|F_x\|^2$:

$$\|\psi\|^2 \leqslant 2\|F\|^2_{a<x<\frac{L}{2}} + 2\|F\|^2_{-a<x<a} + 2\|G\|^2_{-a<x<a}$$

$$= 2\|F\|^2_{a<x<\frac{L}{2}} + 2\|F\|^2_{-a<x<a} + 2a\eta^2\|R\|^2.$$

Последнее слагаемое имеет порядок a^5, поэтому

$$\|\psi\|^2 \leqslant 2(\|F\|^2_{a<x<\frac{L}{2}} + \|F\|^2_{-a<x<a})(1+\varepsilon_3).$$

Значение нормы $\|F\|^2$ существенно зависит от значений величин AB, $A+B$ и A^2+B^2 при различных θ и достаточно малых k. Эти величины будут различного порядка по k при $\theta = 0$ и $\theta \neq 0$. Так, величины $A+B$, AB и A^2+B^2 будут порядка $1/k$, $1/k^2$ и $2/k^2$ при $\theta = 0$ и ограниченными при $\theta \neq 0$. Тогда, оценивая знаменатель и норму $\|F_x\|^2$ сверху, т.е. выбирая значения ψ при $\theta = 0$, получим:

$$\|\psi\|^2 \leqslant \frac{1}{k^2}\left(\frac{4}{L} + o(k^0)\right) \sim \frac{C_1}{k^2},$$

$$\|F_x\|^2 \leqslant k^2\left(\frac{5}{6}L + o(k^0)\right) \sim k^2C_2.$$

Значит, оценка для искомого выражения будет следующей:

$$\frac{M(\psi)}{\|\psi\|^2} \leqslant \frac{1}{C_1}\left(k^4C_2 - \frac{2^7a^2k^2}{\pi d^3(2+\varepsilon)}(1-\varepsilon_2)\right)(1+\varepsilon_3).$$

После минимизации по k окончательно получим

$$\frac{M(\psi)}{\|\psi\|} \leqslant -\frac{C_2}{C_1}\frac{2a^4(1-\varepsilon_2)^2}{\pi^2d^6(2+\varepsilon)^2}(1+\varepsilon_3).$$

Это оценка верхнего края зоны. Она доказывает существование лакуны. Оновременно мы получили следующую оценку лакуны Δ:

$$\Delta \geqslant \frac{C_2}{C_1}\frac{2a^4(1-\varepsilon_2)^2}{\pi^2d^6(2+\varepsilon)^2}(1+\varepsilon_3).$$

Отметим, что полученная оценка не является точной.

Работа поддержана грантом РФФИ 01–01–00253.

Список литературы

[1] *Beenakker C.W.J., van Houten H.* // Solid State Physics. Advances in Research and Applications. 1991. V. 44. P. 1–228.
[2] *Bulla W., Gesztesy F., Renger W., Simon B.* // Proc. Am. Math. Soc. 1997. V. 125. P. 1487–1495.
[3] *Takagaki Y., Ploog K.* // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. N 3. P. 1782–1788.
[4] *Exner P., Vugalter S.A.* // Ann. Inst. Henri Poincare. 1996. V. 65. N 1. P. 109–123.
[5] *Exner P., Vugalter S.A.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1997. V. 30. P. 7863–7878.
[6] *Попов И.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 23. В. 3. С. 57–59.
[7] *Popov I.Yu.* // Rep. Math. Phys. 1999. V. 43. N 3. P. 427–437.
[8] *Popov I.Yu.* // Appl. Math. Lett. 2001. V. 14. P. 109–113.