

УДК 517.938

## ВОЛНОВОДНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Д.Г. Матвеев

Рассмотрены системы из двухмерных и трехмерных плоских волноводов в однородном электрическом поле. Построены соответствующие математические модели, проанализированные с помощью метода прямой вариационной оценки. Продемонстрирована возможность управления положением связанного состояния электрона при помощи внешнего электрического поля в наноструктурах волноводного типа.

**Ключевые слова:** квантовые волноводы, связанные состояния, оценки спектра.

### Введение

Создание наноструктур с заданными свойствами является одним из наиболее развитых направлений современных исследований в области нанотехнологий [1]. Известные решения позволяют производить двух- и трехмерные структуры с определенным набором параметров и характеристик. Различные материалы и легирование предоставляют выбор граничных условий и режимов проводимости [2]. Примеси и пространственные неоднородности привносят дополнительные особенности в электронный транспорт, добавляя резонансы или связанные состояния [3]. Одним словом, технология производства структур различной сложности и размеров уже вышла на принципиально новый уровень и продолжает развиваться. Это ставит вопрос о возможности изменения свойств уже существующих структур для варьирования случаев использования и количества операций над кубитами, выполнимых с помощью конкретной реализации наноразмерной системы.

Одним из примеров решения данного вопроса может быть рассмотрение конкретной математической модели для фиксированной структурной системы с применением внешнего воздействия. Такая модель позволяет спрогнозировать результаты воздействия извне системы на ее ключевые особенности. Оценка зависимости от внешнего электрического поля связанного состояния в системе из двух волноводов, соединенных через отверстие, и является предметом настоящей статьи.

Построены две модели – для случая двухмерных волноводов с отверстием и для случая трехмерных плоских волноводов с квадратным соединительным окном. Начальными параметрами данных моделей являются их пространственные и размерные характеристики: толщина и ширина волноводов, длина и ширина отверстия. При введении поперечного электрического поля в качестве влияющего параметра появляется напряженность. Рассмотренные модели изображены на рис. 1, 2.

Будем оценивать положение собственного значения ниже границы непрерывного спектра для оператора Лапласа у построенных моделей. Известно, что в случае отсутствия электрического поля существует связанное состояние в спектре лапласиана подобной системы [4], что верно и при наличии периодических соединительных отверстий [5].

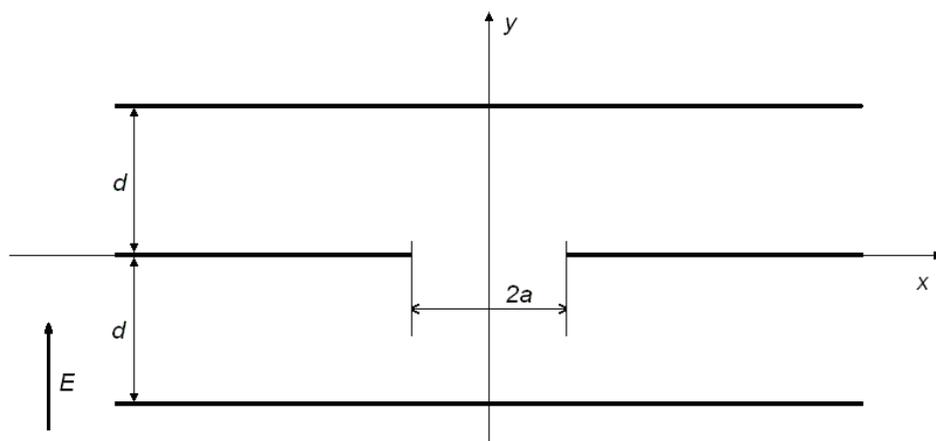


Рис. 1. Двухмерные волноводы с соединительным отверстием

Доказательство существования собственного значения и нахождение зависимости его положения от введенного поля позволят размышлять о возможности управления поведением структуры извне. Управление расположением связанного состояния ведет к управлению электронным транспортом в наноструктуре в принципе. А изменение свойств транспорта в реальном времени открывает путь для реализации квантовых операций любой сложности. Не стоит думать, что приведенная модель является решением всех проблем с квантовыми вычислениями [6], но, по крайней мере, она может рассматриваться

как непосредственное приближение для описания квантово-вычислительных устройств, а результаты дают толчок для продолжения исследований в области управления.

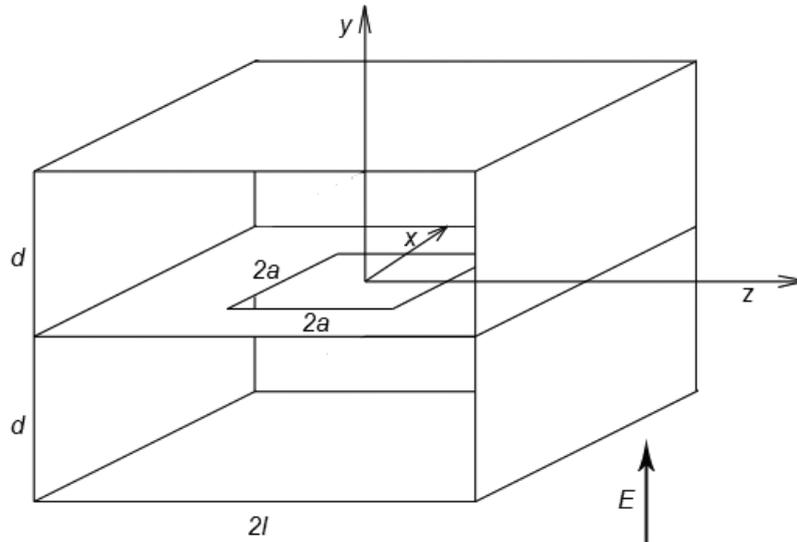


Рис. 2. Трехмерные волноводы с квадратным связующим окном

### Методы исследования

Основным методом, использованным при проведении доказательства, является метод прямой вариационной оценки (метод Ритца). Важной для исследования становится особенность этого метода, заключающаяся в предоставлении оценки сверху для уровня энергий оператора. Последовательность пробных функций приближает реальное решение со стороны верхней границы и предоставляет возможность оценивать его положение относительно границы непрерывного спектра. Действительно, нахождение пробной функции, для которой полученное собственное значение оператора будет расположено ниже обозначенной границы, утверждает о наличии связанного состояния в спектре, находящегося на равном или большем расстоянии от непрерывного спектра.

Построение пробной функции – один из наиболее важных этапов исследования. Полученная функция должна иметь правдоподобные зависимости от основных параметров системы и учитывать вклад электрического поля для поперечных компонент. Оценка, полученная с использованием достоверных функциональных зависимостей, дает возможность анализа пропорциональности результата свойствам системы и позволяет оценить вклад напряженности в изменение ширины зазора в спектре оператора Лапласа.

В случае двумерной модели достаточно определить поведение пробной функции на продолжении волноводов  $F(x, y)$  и в месте разрыва связующей поверхности  $G(x, y)$  для продольной  $x$  и поперечной  $y$  координаты. В трехмерном случае добавляется компонента  $Z(z)$  для описания пробной функции по координате  $z$  вне соединительного окна и компонента  $T(z)$ , характеризующая поведение электрона по координате  $z$  внутри окна. Таким образом, результирующая функция будет иметь следующий вид:

$$\psi(x, y, z) = F(x, y, z) + G(x, y, z)$$

$$(2D: \psi(x, y) = F(x, y) + G(x, y))$$

$$F(x, y, z) = \alpha U(x)V(y)Z(z), \quad G(x, y, z) = \eta P(x)R(y)T(z).$$

$$(2D: F(x, y) = \alpha U(x)V(y), \quad G(x, y) = \eta P(x)R(y))$$

Выбор граничных условий для пробной функции зависит от типа материалов, используемых для квантовых волноводов. Условия Дирихле подходят для диэлектрических гетероструктур, а условия Неймана – для слоистых металлических наноструктур. Стоит отметить, что результаты исследования остаются актуальными при выборе любых из предложенных граничных условий.

Для получения оценки зазора в спектре оператора Лапласа  $H = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  необходимо до-

казать отрицательность разности собственного значения для приведенной функции и граничного собственного значения для непрерывного спектра:

$$H\psi = \lambda_n \psi,$$

$$(H\psi, \psi) = \lambda_0(\psi, \psi)$$

$$\lambda_n = \frac{(H\psi, \psi)}{(\psi, \psi)}, \quad \lambda_n - \lambda_0 < 0,$$

$$\frac{(H\psi, \psi)}{(\psi, \psi)} - \lambda_0 < 0,$$

$$\frac{(H\psi, \psi) - \lambda_0(\psi, \psi)}{(\psi, \psi)} < 0,$$

где  $\lambda_n$  – собственное значение для выбранной пробной функции,  $\lambda_0$  – граница непрерывного спектра.

### Результаты

Доказательство нескольких предварительных лемм и основной теоремы в [7] приводят к интересным результатам.

1. Прослеживается зависимость положения собственного значения от ширины соединяющего отверстия в положительной степени, что подтверждает правильность результата предельным переходом к [4] при отсутствии внешнего поля.
2. Для двухмерного и трехмерного случая, демонстрируется приближенный вид влияния электрического поля как дополнительного члена пропорциональности.

Приведем вид основных результатов для двухмерного случая,

$$\delta \geq \frac{2^{12} a^4 \left( \frac{2m\lambda}{\hbar^2} + \frac{E^2}{16\lambda^2} \right)^2}{\pi^6 d^2 (2 + \varepsilon_1)^2 (2 + \varepsilon_2)},$$

и для трехмерного случая,

$$\delta \geq \frac{3 \cdot 2^{17} a^6 \left( \frac{2m\lambda}{\hbar^2} + \frac{E^2}{16\lambda^2} \right)^2}{\pi^{10} d^2 (3 + 2\varepsilon_1)^2 \|Z\|^4 (2 + \varepsilon_2)}.$$

Здесь  $m$  – масса электрона;  $\hbar$  – постоянная Планка;  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  – положительные константы.

Можно заметить, что в обоих случаях ширина зазора  $\delta$  не имеет явной пропорциональной зависимости от напряженности электрического поля. Этот факт имеет реальный физический смысл – исключение влияния внешнего поля вызовет не исчезновение связанного состояния, а лишь его перемещение в спектре оператора Лапласа, что хорошо согласуется с результатами [4].

С другой стороны, изменение внешнего воздействия посредством варьирования напряженности влечет за собой сдвиг собственного значения на контролируемое расстояние в выбранном направлении, позволяя управление характеристиками электронного транспорта в подобных системах.

Учитывая тот факт, что при изгибе плоских волноводов (включая слабый) связанные состояния могут переходить в резонансы [3], управление положением собственного значения может также иметь свое развитие в управлении положением резонансов системы, что является возможным продолжением исследования в этой области.

### Заключение

Результаты исследования дают основания полагать, что существует реальная возможность обеспечить динамическое изменение свойств электронного транспорта в наноструктурах волноводного типа. Использование данной возможности позволит добиться увеличения числа различных результатов взаимодействия частиц при прохождении системы и поведения частиц в самой системе.

Являясь приближением операции над кубитами, рассмотренная модель приводит к выводу о реальности контролируемых квантовых операций в устройствах подобного типа. А это есть достаточное обоснование, непосредственно приближающее нас в теории к созданию квантовых вычислителей революционно нового типа на практике.

### Литература

1. Алферов Ж.И., Асеев А.Л., Гапонов С.В., Копьев П.С., Сурис Р.А. Наноматериалы и нанотехнологии // Нано- и микросистемная техника. – 2003. – С. 3–13.
2. J.C. Ho et al. Controlled nanoscale doping of semiconductors via molecular monolayers // Nature Mater. – 2008. – № 7. – 62 p.
3. Hynek Kovařík and Andrea Sacchetti. Resonance in twisted quantum waveguides // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. – 2007. – V. 40. – № 29.

4. Exner P. Laterally Coupled Quantum Waveguides // Cont. Math. – 1998. – V. 217. – P. 69–82.
5. Мельничук О.П., Попов И.Ю. Квантовые волноводы, связанные через периодическую систему малых отверстий: оценка запрещенной зоны // Письма в ЖТФ. – 2002. – Т. 28. – Вып. 8. – С. 69–73.
6. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. – М.: Мир, 2006. – 824 с.
7. Matveev D.G., Popov I.Yu. Bound Electron States in a System of Coupled Waveguides in a Transverse Electric Field // Technical Physics Letters. – 2009. – V. 35. – № 11. – P. 1007–1009.

*Матвеев Дмитрий Геннадьевич* – Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, аспирант, d.g.matveev@gmail.com