

ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЧЕРЕЗ ДИСКРЕТНЫЕ УРОВНИ В КОНТИНУУМЕЧ. С. Ким^{а*}, А. М. Сатанин^{б†}^а Department of Physics, Chonnam National University, Kwangju, Korea^б Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603600, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 6 июня 1998 г.

Изучается баллистический транспорт в квантовых каналах, содержащих притягивающие примеси. Показано, что когерентное взаимодействие между асимметричными резонансами может приводить к исчезновению резонансов и появлению дискретных уровней в континууме при вполне определенных (критических) значениях параметров системы. Впервые изучено туннелирование электрона через дискретные уровни. Найдено, что структура прозрачности качественно меняется, когда рассеивающиеся электроны на бесконечности имеют энергию, совпадающую с энергией дискретных уровней. При критических параметрах в системе может быть реализован новый тип вырождения, когда одно состояние описывается локализованной волновой функцией, а другое — распространяющейся. Вычислены критические значения параметров структуры и обсуждается экспериментальная реализация предсказанного эффекта в двумерных каналах.

1. ВВЕДЕНИЕ

После открытия квантования проводимости двумерные наноструктуры могут рассматриваться как полигон для демонстрации новых квантовых когерентных эффектов [1]. Кондактанс наноструктуры выражается через прозрачность канала [2, 3] и определяется дифракцией электронов на квантовой структуре и интерференцией волн при рассеянии на примесях. Изучению резонансов и провалов в прозрачности (или проблемы квантовой эрозии проводимости) посвящено большое число экспериментальных [4–6] и теоретических [7–19] работ. В частности, в работах [8–17] было показано, что уединенная притягивающая примесь в канале приводит к появлению асимметричного резонанса в прозрачности — резонанса Фано [20]. В случае, когда в канале имеются две притягивающие примеси, можно выделить два типа резонансов: обычные резонансы Брейта—Вигнера и резонансы, обусловленные «квазидонорными» уровнями, формируемыми виртуальными потенциальными ямами ниже каждой из высших подзон — резонансы Фано. Как известно, ширина резонанса Брейта—Вигнера может обратиться в нуль только тогда, когда квазисвязанное состояние отделено от распространяющихся состояний бесконечно высокими стенками. В цитированных работах обсуждались только ситуации, когда резонансные уровни имеют конечную ширину. Однако для резонансов Фано имеется новая возможность обращения в нуль их ширины.

В данной работе будут исследованы когерентные эффекты, имеющие место при взаимодействии резонансов Фано.

*C. S. Kim.

†E-mail: satanin@phys.unn.runnet.ru

Прежде всего покажем, что возможны ситуации, когда ширины асимметричных резонансов обращаются в нуль. Как следствие, появляются дискретные уровни в континууме. Возможность таких состояний в квантовой теории обсуждали еще фон Нейман и Вигнер на примере модельного потенциала [21]. Такого же типа состояния обнаружены в атомных системах [23, 24] (см. Приложение в [25]). Ниже будет показано, что дискретные уровни могут появляться в квантовых каналах при реалистических значениях параметров системы. Мы получим волновую функцию дискретных уровней в явной форме.

Далее, мы изучим туннелирование через дискретные уровни и получим амплитуду прохождения в случае, когда энергия туннелирующего электрона совпадает с энергией дискретных уровней. Покажем, что возможно нетривиальное вырождение состояний дискретного и непрерывного спектров, а также что состояния разного типа могут быть приготовлены путем выбора различных граничных условий.

Наконец, мы представим оценки параметров наноструктуры и примеси. Мы обсудим условия возникновения дискретных уровней в квантовых каналах и следствия для проблемы примесной эрозии.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 мы кратко обсудим общий подход к описанию квантовых состояний в каналах. В разд. 3 аналитически и численно изучим резонансную структуру матрицы рассеяния в случае уединенной примеси. Матричные элементы примесного потенциала вычислены в Приложении. В разд. 4 мы исследуем когерентное взаимодействие резонансов Фано в случае двух притягивающих примесей. В разд. 5 покажем, что возможно появление дискретных уровней в континууме. Раздел 6 отведен обсуждению структуры амплитуды рассеяния для критических значений параметров системы. В разд. 7 рассмотрим обобщение результатов на случай уровней, лежащих вблизи высших зон. Наконец, в разд. 8 мы суммируем результаты и обсуждаем возможное приложение новых когерентных эффектов.

2. ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ И УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим двумерный квантовый канал — квантовый волновод, расположенный вдоль оси x . Пусть запирающий потенциал (потенциал конфайнмента), действующий в поперечном направлении, описывается функцией $V_c(y)$; например, это может быть параболическая или прямоугольная яма. Предполагается, что вдоль оси волновод достаточно длинный и что он присоединяется к омическим контактам на больших расстояниях от начала координат. Потенциал примесей будем описывать функцией $V(x, y)$. Волновая функция электронов в волноводе находится из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) + V_c(y)\Psi(x, y) + V(x, y)\Psi(x, y) = E\Psi(x, y). \quad (1)$$

Для канала без примесей $V(x, y) = 0$, и в этом случае волновая функция и энергия записываются в виде

$$\psi_{n,k}^{(0)}(x, y) = e^{ikx} \varphi_n(y), \quad (2)$$

$$E_{nk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_n, \quad (3)$$

где $\varphi_n(y)$ и E_n определены решениями уравнения

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_c(y) \right\} \varphi_n(y) = E_n \varphi_n(y). \quad (4)$$

Волновую функцию $\Psi(x, y)$ удобно разложить по полному базису, порождаемому решениями уравнения (4):

$$\Psi(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x) \varphi_n(y). \quad (5)$$

Подставив (5) в (1), найдем уравнение для $\psi_n(x)$ в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x) + \sum_{n'=1}^{\infty} V_{n,n'}(x) \psi_{n'}(x) = (E - E_n) \psi_n(x). \quad (6)$$

где

$$V_{n,n'}(x) = \int \varphi_n(y) V(x, y) \varphi_{n'}(y) dy \quad (7)$$

— матричные элементы примесного потенциала.

Будем интересоваться амплитудами прохождения $t_{n,n'}$ и отражения $r_{n,n'}$, которые описывают рассеяние электронов из канала с номером n' в канал с номером n . Амплитуды прохождения $t_{n,n'}(E)$, рассматриваемые как функции энергии E , содержат богатую информацию о системе. Во-первых, полюсы амплитуды в комплексной плоскости E соответствуют уровням или резонансам. Во-вторых, амплитуда определяет кондактанс G структуры. В частности, кондактанс, измеряемый двухзондовым методом, определяется формулой Буттикера—Ландауэра [2, 3]

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,n'} T_{n,n'} \quad (8)$$

в терминах коэффициентов прохождения $T_{n,n'}$ системы, где n и n' означают номера падающих и рассеянных волн. Коэффициенты $T_{n,n'}$ задаются выражением

$$T_{n,n'} = \frac{k_n}{k_{n'}} |t_{n,n'}|^2. \quad (9)$$

Суммирование в (8) пробегает по всем распространяющимся для данной энергии E состояниям в квантовом волноводе.

3. РАССЕЯНИЕ НА ОДИНОЧНОЙ ПРИМЕСИ И РЕЗОНАНСЫ ФАНО

Будем моделировать примесь короткодействующей (в направлении движения электрона) ямой, центр которой может быть расположен в точке (X_s, Y_s) . Такого рода потенциал определяется матричными элементами вида

$$V_{n,n'}(x) = -\frac{\hbar^2}{m} v_{n,n'} \delta(x - X_s). \quad (10)$$

где $v_{n,n'} \equiv v_{n,n'}(Y_s)$, $v_{n,n'} > 0$. Для получения оценок и проведения численных расчетов будем рассматривать модель примеси, введенную в работе [18]. Параметры ямы и матричные элементы представлены в Приложении.

Как следует из (6) и (10), короткодействующий потенциал эквивалентен граничным условиям для многокомпонентной функции ($X_s = 0$):

$$\psi_n(0^+) - \psi_n(0^-) = 0, \quad \psi'_n(0^+) - \psi'_n(0^-) = -2 \sum_{n'=1}^{\infty} v_{n,n'} \psi_{n'}. \quad (11)$$

Теперь обсудим приближение, касающееся матричных элементов потенциала, которое будет сделано для получения аналитических результатов. Будем считать выполненными неравенства

$$\frac{\hbar^2}{2m} v_{n,n'}^2 \ll |E_n - E_{n'}|, \quad n \neq n', \quad (12)$$

где $|E_n - E_{n'}|$ — расстояние между уровнями размерного квантования (в потенциале $V_c(y)$). В этом случае можно рассматривать недиагональные элементы матрицы $V_{n,n'}$ в (6) по теории возмущений. Если сохранить только диагональные элементы $v_{n,n'}$, то решение (6) записывается в виде

$$\psi_n(x) = \sqrt{v_{n,n}} \exp(-v_{n,n}|x|), \quad (13)$$

$$\epsilon_n = E_n - \hbar^2 v_{n,n}^2 / 2m. \quad (14)$$

Как следует из (14), в этом случае уровни отщепляются от каждой подзоны размерного квантования. Поправки к уровню ϵ_1 могут быть найдены с использованием обычной теории возмущений. Такие поправки будут малы в соответствии с неравенствами (12). Состояния высших подзон располагаются в континууме низших подзон. Поправки к ϵ_n при $n \geq 2$ необходимо вычислять по теории возмущений для вырожденных уровней [26]. Поскольку мы имеем дело с распространяющимися состояниями, удобно изучать полюсы матрицы рассеяния. Чтобы найти матрицу рассеяния для уединенной примеси, решим уравнение (6) в областях, где примесный потенциал равен нулю:

$$\psi_n = \begin{cases} A_n \exp(ik_n x) + B_n \exp(-ik_n x), & x < 0, \\ C_n \exp(ik_n x), & x > 0, \end{cases} \quad (15)$$

где $k_n = \sqrt{2m(E - E_n)}/\hbar$. Заметим, что решения с действительным k_n принадлежат распространяющимся состояниям, тогда как состояния с мнимыми $k_n = i|k_n|$ представляют собой неоднородные волны. Подставляя (15) в (11), находим

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}, \quad \ell \mathbf{C} = i \mathbf{k} \mathbf{A}. \quad (16)$$

где использованы матричные обозначения

$$(\ell)_{n,n'} = ik_n \delta_{n,n'} + v_{n,n'}, \quad (\mathbf{k})_{n,n'} = k_n \delta_{n,n'}, \quad (17)$$

а амплитуды волн рассматриваются как бесконечные векторы: $(\mathbf{A})_n = A_n$ и т. д. Введем матрицы прохождения и отражения: соответственно $\mathbf{C} = t \mathbf{A}$ и $\mathbf{B} = g \mathbf{A}$. Из (16) найдем

$$t = i\ell^{-1}\mathbf{k} \quad \text{и} \quad \mathbf{r} = i\ell^{-1}\mathbf{k} - \mathbf{1}. \quad (18)$$

В случае, когда энергия частицы лежит вблизи дна первой зоны, применимо одноканальное приближение. Матрица t имеет один элемент для открытого канала: $t_{11}(E) = ik_1(ik_1 + v_{11})^{-1}$. Полос функции $t_{11}(E)$ в комплексной плоскости энергии имеет место при $k_1 = -iv_{11}$ или когда $E = \epsilon_1$, где величина ϵ_1 определена (14). Если энергия E подчиняется неравенству $E_1 < E < E_2$ и лежит вблизи ϵ_2 , следует точно рассмотреть двухканальную аппроксимацию, поскольку в этом случае два состояния имеют близкие энергии. Например, амплитуда прохождения в открытом канале записывается как

$$t_{11}(E) = \frac{ik_1(ik_2 + v_{22})}{(ik_1 + v_{11})(ik_2 + v_{22}) - v_{12}^2}. \quad (19)$$

Амплитуда $t_{11}(E)$ имеет полюс, когда

$$\tilde{E} = E_2 - \frac{\hbar^2}{2m} \left(v_{22} - \frac{v_{12}^2}{ik_1 + v_{11}} \right)^2. \quad (20)$$

Можно переписать (20) приближенно как

$$E_p \simeq E_2 - \frac{\hbar^2 v_{22}}{2m} \left(v_{22} - \frac{2v_{11}v_{12}^2}{k_1^2 + v_{11}^2} \right), \quad \Gamma \simeq \frac{\hbar^2 k_1 v_{12}^2 v_{22}}{2m(k_1^2 + v_{11}^2)}. \quad (21)$$

Сравнивая этот результат с (14), можно увидеть, что перенормировка положения уровня и появление у него ширины связаны с резонансным взаимодействием уровня с непрерывным спектром состояний континуума зоны $n = 1$. Важно отметить, что амплитуда $t_{11}(E)$ имеет нуль, когда $|k_2| = v_{22}$ или для энергии

$$E_0 = E_2 - \hbar^2 v_{22}^2 / 2m. \quad (22)$$

Из (21) и (22) видно, что энергии полюса \tilde{E} и нуля E_0 расположены близко в комплексной плоскости, поскольку

$$|\tilde{E} - E_0| \sim \frac{\hbar^2 v_{12}^2}{2m} \frac{v_{22}}{\sqrt{k_1^2 + v_{11}^2}} \ll E_p \sim E_0. \quad (23)$$

Мы заключаем, что вблизи нуля и полюса амплитуда может быть представлена в виде

$$t_{11}(E) \sim \frac{E - E_0}{E - \tilde{E} + i\Gamma}, \quad (24)$$

где E_0 , E_p и Γ — параметры резонанса Фано [20].

На рис. 1 изображена вероятность прохождения через канал с притягивающей примесью как функция $\sqrt{E/E_1}$ ($E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mW^2$, W — ширина канала) в случае, когда параметры примеси $v_{11} = 1.261$, $v_{22} = 0.785$ и $v_{12} = -0.218$ (матричные элементы представлены в единицах π/W) были рассчитаны согласно формуле (87) из Приложения. Выражения для других параметров примеси также представлены в Приложении. Можно видеть, что прозрачность имеет структуру резонансно-антирезонансной пары. Пунктирной кривой на рис. 1 изображена монотонно возрастающая с энергией функция — прозрачность в одноканальном приближении.

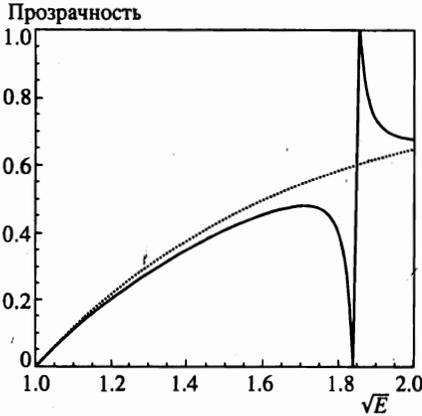


Рис. 1. Коэффициент прохождения через волновод с одиночной примесью для интервала энергий $E_1 < E < E_2$, где E берется в единицах $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mW^2$. Непрерывная кривая описывает коэффициент прохождения $T_{11}(E)$ из уравнения (19), пунктирная кривая определяет прозрачность в одноканальном приближении

Таким образом, когда электрон рассеивается на притягивающей примеси, амплитуда рассеяния имеет форму резонанса Фано. Если энергия E_0 действительна, то прозрачность обращается в нуль для $E = E_0$, а рядом имеется пик шириной Γ вблизи E_0 . Для $E = E_0$ мы видим, что $t_{11} = 0$, $r_{11} = -1$, и электрон будет отражаться полностью от примеси. Отметим, что для энергий, которые расположены вблизи верхних зон, амплитуда может быть также представлена в форме резонанса Фано, но в общем случае величина E_0 комплексная, и отражение от примеси не будет совершенным. Для иллюстрации рассмотрим случай, когда энергия частицы лежит в интервале энергий $E_2 < E < E_3$. Изучим более детально амплитуду t_{11} , найденную путем обращения ℓ в трехканальном приближении. Энергия нуля прозрачности определяется выражением

$$E_0 = E_3 - \frac{\hbar^2}{2m} \left(v_{33} - \frac{v_{23}^2}{ik_2 + v_{22}} \right)^2 \tag{25}$$

Мы можем разложить (25) в ряд по теории возмущений, если имеется малый параметр (12). Как следует из (25), правая часть для нуля действительна, когда $E_1 < E < E_2$, поскольку в этом случае $ik_2 = -|k_2|$. При этом амплитуда прохождения имеет форму резонанса Фано (24) и отражение от примеси может быть полным. Когда энергия частицы располагается в интервале $E_2 < E < E_3$, амплитуда t_{11} также имеет нуль, однако энергия нуля прозрачности сдвигается в комплексную плоскость:

$$\begin{aligned} \widetilde{E}_0 &= E_0 - i\gamma, \\ E_0 &\simeq E_3 - \frac{\hbar^2 v_{33}}{2m} \left(v_{33} - \frac{2v_{23}v_{22}}{k_2^2 + v_{22}^2} \right), \quad \gamma \simeq \frac{\hbar^2 k_2 v_{23}^2 v_{33}}{m(k_2^2 + v_{22}^2)}, \end{aligned} \tag{26}$$

где дополнительно потребовано неравенство $v_{23} \ll v_{33}$, чтобы получить обозримую формулу. Из проведенного рассмотрения заключаем, что полное отражение имеет место, когда энергия лежит в интервале $E_1 < E < E_2$. Как это следует из выражения (21), энергия нуля прозрачности будет действительной величиной, если примесь расположена в центре волновода. В этом случае матричный элемент $v_{23} = 0$ и отражение будет полным.

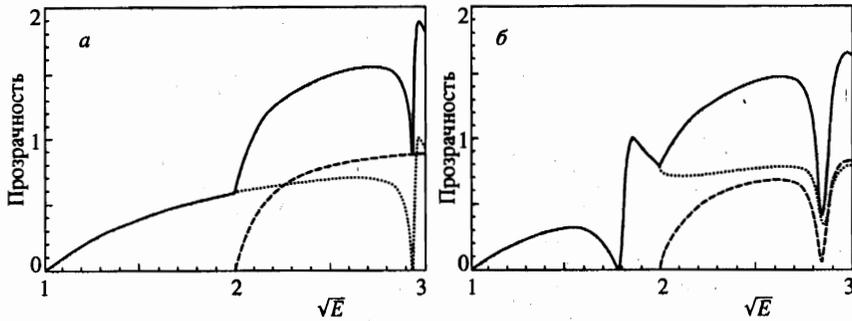


Рис. 2. Коэффициент прохождения через волновод с одиночной примесью для интервала энергий $E_1 < E < E_3$, где E в единицах $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mW^2$: а — для примеси в центре канала, $Y_s = 0$; б — для $Y_s = 0.15W$. Непрерывная кривая описывает полную прозрачность (или кондактанс в единицах $2e^2/h$); пунктирная кривая определяет $T_{11}(E)$ согласно уравнению (19); штриховая — прозрачность $T_{22}(E)$

Чтобы продемонстрировать природу резонансов Фано в зависимости от положения примеси в канале, уравнение (16) решалось численно. На рис. 2 приведены кривые $T_{11}(E)$ для двух различных положений Y_s центра примеси: $Y_s = 0$ и $Y_s = 0.15W$. Параметры примеси были вычислены согласно формуле (87) из Приложения.

4. КОГЕРЕНТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РЕЗОНАНСОВ ФАНО

Как отмечалось выше, электрон сильно отражается от примеси, если его энергия близка к энергии нуля резонанса Фано E_0 . Рассмотрим теперь две примеси, расположенные на расстоянии L , и изучим взаимодействие резонансов Фано. Нам будет удобно обратиться к обобщенной схеме Фабри—Перо и использовать хорошо известный метод декомпозиции. Согласно этому методу, матрица рассеяния для двух примесей записывается в виде

$$t = t_2 \left(\frac{1}{1 - r_1 r_2} \right) t_1. \quad (27)$$

где t_1 , r_1 и t_2 , r_2 — амплитудные матрицы соответственно первой и второй примесей. В правой части уравнения (27) приняты во внимание все процессы прохождения, отражения и преобразования волн при рассеянии на двух примесях. Уравнение (27) будет положено в основу анализа прохождения электрона через структуру с примесями.

Матрица рассеяния для каждой примеси может быть получена так, как это сделано в предыдущем разделе. Однако следует учесть, что примеси сдвинуты относительно начала координат на $x = \pm L/2$, так что фазы t и r теперь отличаются от (18):

$$t_1 = i d \ell_1^{-1} k d^{-1}, \quad r_1 = d \left(i \ell_1^{-1} k - 1 \right) d, \quad (28)$$

$$t_2 = i d^{-1} \ell_2^{-1} k d, \quad r_2 = d \left(i \ell_2^{-1} k - 1 \right) d. \quad (29)$$

Здесь матрицы ℓ_1 и ℓ_2 зависят от параметров примесей и могут быть найдены из (17); $d_{n,n'} = \exp(i\theta_n) \delta_{n,n'}$, $\theta_n = k_n L/2$, L — расстояние между примесями.

Для упрощения вычислений преобразуем уравнение (27) к более удобной форме. Подставив (28) и (29) в (27), найдем

$$t = M^{-1}k, \quad (30)$$

где

$$M = M_1 k^{-1} M_2 + i(\ell_1 - \ell_2), \quad (31)$$

$$M_1 = \ell_1(d + d^{-1}) - ikd, \quad M_2 = (d - d^{-1})\ell_2 - ikd. \quad (32)$$

Как следует из (27), нетривиальные свойства зависимости амплитуды прохождения от энергии определяются свойствами матрицы M . Случай идентичных примесей может быть изучен наиболее просто. В этом случае $\ell_1 = \ell_2$ и матрица M может быть факторизована: $M = M_1 k^{-1} M_2$. Физическая причина такой факторизации связана с симметрией системы. Так как гамильтониан инвариантен при преобразовании $x \rightarrow -x$, решения уравнения Шредингера могут быть выбраны с определенной четностью. Тогда легко показать, что матрица $M_s \equiv M_1$ отвечает за симметричные состояния в виртуальных каналах; подобным образом матрица $M_a \equiv M_2$ отвечает за антисимметричные состояния. Матричные элементы матриц M_s и M_a определяются из выражения (32):

$$(M_s)_{n,n'} = 2\ell_{n,n'} \cos \theta_{n'} - ik_n \exp(i\theta_n) \delta_{n,n'}, \quad (33)$$

$$(M_a)_{n,n'} = 2i\ell_{n,n'} \sin \theta_n - ik_n \exp(i\theta_n) \delta_{n,n'}. \quad (34)$$

Чтобы найти полюсы и нули матрицы t , перепишем (30) в виде

$$t = \frac{M_c}{\det M} k, \quad (35)$$

где M_c — присоединенная к M матрица [27]. Из (35) следует, что полюсы матрицы M будут определяться уравнением

$$\det M = 0, \quad (36)$$

а нули — уравнениями вида

$$M_c = 0. \quad (37)$$

В силу того что матрица факторизуется: $M = M_s k^{-1} M_a$, можно переписать (36) независимо для симметричных и антисимметричных состояний соответственно

$$\det M_s = \det [(\ell(d + d^{-1}) - ikd)] = 0, \quad (38)$$

и

$$\det M_a = \det [(d - d^{-1})\ell - ikd] = 0. \quad (39)$$

Отметим, что уравнения (38) и (39) в отличие от более общего уравнения (36) содержат матрицу ℓ , поэтому нет необходимости обращать матрицы при анализе полюсов.

Теперь определим матрицы для интервала энергий $E_1 < E < E_2$ и рассмотрим случай, когда энергия электрона лежит вблизи неперенормированного уровня, отщепившегося от E_2 . При этом возможно сильное взаимодействие резонансов волн в двух каналах, которое следует учитывать точно. Ниже мы рассмотрим подробно только случай симметричных состояний. Используя (38) и (33), найдем уравнение для полюса:

$$2(v_{22} - |k_2|) \operatorname{ch}(|\theta_2|) + |k_2| \exp(-|\theta_2|) = 4v_{12}^2 \frac{\operatorname{ch}|\theta_2| \cos \theta_1}{2(ik_1 + v_{11}) \cos \theta_1 - ik_1 \exp(i\theta_1)}. \quad (40)$$

Нас будут интересовать решения уравнения (40), которые связаны с резонансами Фано и расположены близко к реальной оси энергий. Решим уравнение (40) путем разложения по малому параметру, когда справедливо неравенство (12). Пусть E^{0s} решение уравнения

$$2(v_{22} - |k_2|) \operatorname{ch}|\theta_2| + |k_2| \exp(-|\theta_2|) = 0. \quad (41)$$

Другими словами, E^{0s} определяет невозмущенное положение полюса. Поправка находится из уравнения (40):

$$\widetilde{E}_p^s = E_p^s - i\Gamma^s, \quad (42)$$

где

$$E_p^s = E^{0s} - 2 \frac{\hbar^2 v_{12}^2 v_{11}}{m} \frac{(2k_1 \sin \theta_1 + 2v_{11} \cos \theta_1) \cos \theta_1}{k_1^2 + 4v_{11}^2 \cos^2 \theta_1 + 4v_{11} k_1 \sin \theta_1 \cos \theta_1}, \quad (43)$$

$$\Gamma^s = 2 \frac{\hbar^2 v_{12}^2}{m} \frac{k_1 v_{11} \cos^2 \theta_1}{k_1^2 + 4v_{11}^2 \cos^2 \theta_1 + 4v_{11} k_1 \sin \theta_1 \cos \theta_1}. \quad (44)$$

Теперь найдем энергию, когда прозрачность обращается в нуль. Нули амплитуды t могут быть получены из (37). Изучим нули $(M_c)_{11} = 0$, которые определяются из выражения

$$\begin{aligned} & [2(v_{22} - |k_2|) \operatorname{ch}|\theta_2| + |k_2| \exp(-|\theta_2|)] [2(v_{22} - |k_2|) \operatorname{sh}|\theta_2| - |k_2| \exp(-|\theta_2|)] = \\ & = 4v_{12}^2 \sin \theta_1 \cos \theta_1. \end{aligned} \quad (45)$$

Затрабочное положение нуля следует из (45), где было положено $v_{12} = 0$. В симметричном случае это уравнение совпадает с (41). Важно, что неперенормируемые значения энергий нуля и полюса в точности совпадают. Поправки к положению нуля находятся из (45):

$$E^0 = E_0^0 - 2 \frac{\hbar^2 v_{12}^2 v_{11}}{m k_1} \sin \theta_1 \cos \theta_1. \quad (46)$$

Отметим, что волновые векторы и фазы в правых частях формул (43), (44) и (46) зависят от неперенормированных энергий полюса (или нуля).

Рассчитанная численно прозрачность структуры T как функция $\sqrt{E/E_1}$ изображена на рис. 3, когда расстояние между примесями равно $L = 1.8v_{22}^{-1}$. Пунктирной линией на рис. 3 изображен вклад в прозрачность от второй подзоны. В интервале энергии $E_1 < E < E_2$ видны резонанс Брейта—Вигнера, который расположен при $\widetilde{E}_1 = 2.120$

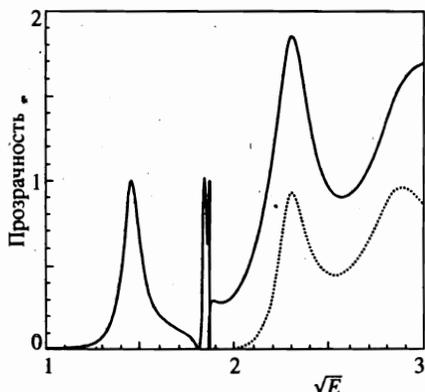


Рис. 3. Коэффициент прохождения симметричной двухпримесной системы для интервала энергий $E_1 < E < E_3$. Расстояние между примесями есть $L = 1.8 v_{22}^{-1}$. Пунктир — вклад в прозрачность от второй подзоны

и имеет ширину $\Gamma_1 = 0.322$, а также пара резонансов Фано с параметрами $E_p^s = 3.382$, $\Gamma_s = 0.092$, $E_0^s = 3.290$ и $E_p^a = 3.486$, $\Gamma_a = 0.0045$, $E_0^a = 3.495$ (в качестве единицы энергии выбрана E_1). Для интервала энергий $E_2 < E < E_3$ при данных параметрах имеются только резонансы Брейта—Вигнера.

Суммируем полученные результаты и следствия, вытекающие из нашего рассмотрения. Как показывает анализ, взаимодействие резонансов приводит к появлению резонансно-антирезонансных пар: нули расположены на действительной оси, тогда как полюсы лежат в комплексной плоскости. Вблизи энергий, связанных с симметричной и антисимметричной парами, амплитуда имеет структуру резонанса Фано и может быть приближенно описана выражением (24), см. рис. 1. Эта структура связана с виртуальными состояниями в «молекуле», у которой связующие и антисвязующие уровни расположены в континууме и имеют поэтому конечную ширину. Данный вывод согласуется с численным результатом из [10], однако не совпадает с ним. Качественное различие связано с тем, что для модели примесей, использованной в [10], резонанс «закрыт» нулем, и он не виден в области прозрачности.

5. ДИСКРЕТНЫЕ УРОВНИ В КОНТИНУУМЕ

Теперь покажем, что для определенных значений параметров системы ширина резонансов может обратиться в нуль. Как это следует из (42), величина Γ^s будет равна нулю, если

$$\cos \theta_1 = 0. \tag{47}$$

Чтобы это имело место, уравнения (41) и (47) должны иметь общее решение. Таким образом, в этом случае можно сформулировать двухпараметрическую спектральную задачу. Например, если выбрать в качестве параметров энергию частицы E и расстояние между примесями L , то эти два спектральных параметра можно найти из уравнений (42) и (47). Прежде всего перепишем (42) и (47) в виде

$$\text{th} |\theta_2| = \frac{v_{22}L}{|\theta_2|} - 1, \quad \cos \theta_1 = 0. \tag{48}$$

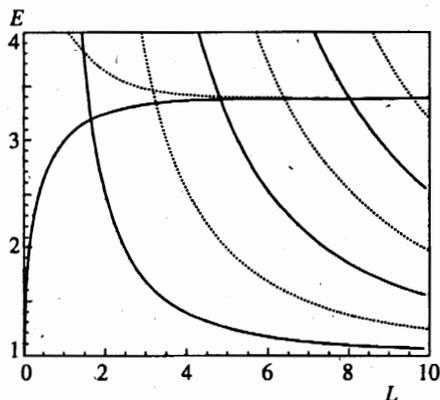


Рис. 4. Двухпараметрическая спектральная задача. Графическое отыскание решений $(E(j), L(j))$, где E и L берутся соответственно в единицах $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mW^2$ и v_{22}^{-1} . Пересечение непрерывных кривых определяет симметричные связанные состояния, а пересечение каждой из пунктирных кривых с непрерывной — антисимметричные состояния

Первое из этих выражений в точности эквивалентно уравнению, которое определяет уровни в двух ямах, соответствующих короткодействующим потенциалам. Однако энергия связи в квантовом волноводе лежит выше, чем в свободном пространстве, на величину E_2 . Рассматривая асимптотики $|\theta_2| \sim v_{22}L/2$ для $v_{22}L \gg 1$ и $|\theta_2| \sim v_{22}L$ для $v_{22}L \ll 1$, можно установить, что решение E лежит в интервале $E_2 - 4\hbar^2 v_{22}^2 / 2m < E < E_2 - \hbar^2 v_{22}^2 / 2m$.

Соответственно, квазисвязанные состояния располагаются выше энергии нуля резонанса Фано одной ямы (22). Второе условие (48) переписывается как

$$E = E_1 + \frac{\hbar^2 \pi^2 (2j + 1)^2}{2mL^2}, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (49)$$

Таким образом, уравнения (48) и (49) определяют спектральные характеристики $E(j)$ и $L(j)$. Решение уравнений (48) легко найти численно. Аналогичный анализ выполнен для антисимметричных состояний, но в этом случае решение существует только при $v_{22}L > 1$. На рис. 4 представлено графическое решение уравнений для двухпараметрической задачи, где $v_{22} = 0.785$ и $v_{12} = -0.218$ (величина π/W снова выбрана в качестве единицы). Пересечение непрерывных кривых, согласно (48), позволяет определить дискретные уровни и критические расстояния $(E(j), L(j))$ для симметричных состояний. Аналогично, пересечение пунктирной линии с непрерывной кривой дает критические параметры антисимметричных состояний системы. Значения нескольких первых критических параметров приведено в таблице. Отметим, что вместо расстояния L может оказаться удобным выбрать другой параметр, например ширину квантового канала W .

Используя уравнение (6), найдем волновую функцию для дискретных уровней в явном виде. Волновая функция дискретных уровней нормируется условием

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int |\psi_n(x)|^2 dx = 1. \quad (50)$$

Решая (6) в двухканальном приближении (как и в разд. 3), находим

$$\psi_1(x) = \begin{cases} a_1 \cos(k_1 x), & |x| < L/2, \\ 0, & |x| > L/2, \end{cases} \quad (51)$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} a_2 \operatorname{ch}(|k_2|x), & |x| < L/2, \\ c_2 \exp(-|k_2||x|), & |x| > L/2, \end{cases} \quad (52)$$

где a_1 , a_2 и c_2 — константы, которые определяются граничными условиями и нормировкой. Решение ψ_1 представляет собой стоячую волну в открытом канале, а ψ_2 — локализованное состояние в закрытом канале. Мы видим, что стоячая волна ψ_1 заперта вследствие отражения от «зеркал» Фано. Волновая функция для критических параметров $(L(0), E(0))$ показана на рис. 5.

Таким образом, для определенных значений параметров, которые мы называем критическими, $(E(j), L(j))$, полюс матрицы прохождения «выходит» на действительную ось энергии. Это означает, что дискретные уровни появляются в континууме. Рассмотрим, что будет с энергией нуля амплитуды рассеяния t_{11} . Согласно (46) для критических параметров поправки к положению нуля также исчезают, т. е. для критических параметров $(E(j), L(j))$ энергия нуля и полюса совпадают. Иными словами, полюс и нуль должны исчезнуть у амплитуды прохождения при одних и тех же значениях параметров. В общем случае это означает, что в соответствующих каналах элементы присоединенной матрицы M_c и детерминант матрицы M должны быть равны нулю,

$$M_c = 0, \quad \det M = 0, \quad (53)$$

для критических параметров.

Разложим присоединенную матрицу и ее детерминант для критического расстояния $L = L(j)$ и энергии, расположенной вблизи критического значения $E = E(j) + \varepsilon$, $|\varepsilon| \leq E(j)$. Поскольку для критических параметров должно быть справедливо (53), находим

$$M_c = \varepsilon M'_c, \quad \det M = \varepsilon \det M', \quad (54)$$

где $f' \equiv \partial f(E)/\partial E$ для $E = E(j)$. Мы видим, что в этом случае амплитуда должна быть конечной:

Спектральные значения дискретных уровней и критических расстояний $(E(j), L(j))$

j	$E(j)/E_1$	$L(j)v_{11}$
симметричные состояния		
0	3.1878	0.1613 [+1]*
1	3.3734	0.4795[+1]
2	3.3828	0.7991[+1]
3	3.3832	0.1129[+2]
антисимметричные состояния		
1	3.3853	0.3195[+1]
2	3.3831	0.6393[+1]
3	3.3832	0.9590[+1]

* [+n] $\equiv 10^n$.

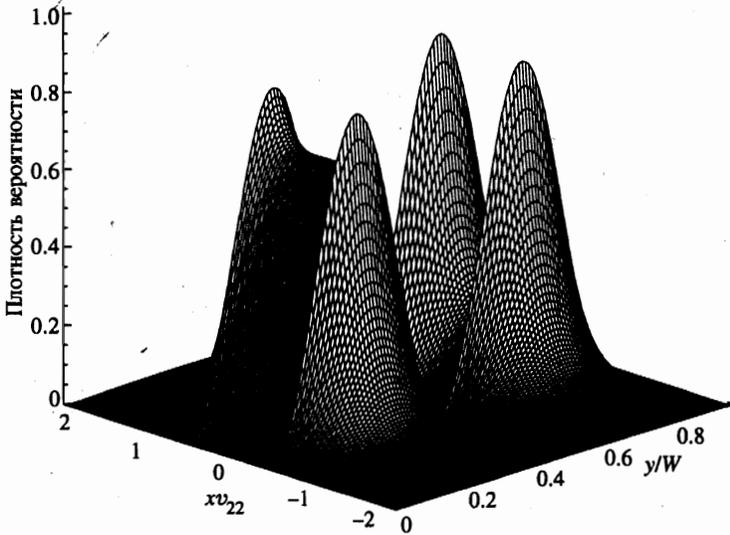


Рис. 5. Квадрат модуля волновой функции критического состояния для $E_c = 3.1878E_1$ и $L_c = 1.613v_{22}^{-1}$

$$t \sim \frac{M_c'}{\det M'} k. \quad (55)$$

Таким образом, как это следует из (35) и (55), амплитуда прохождения качественно меняется для $E = E(j)$. Более детально модификация амплитуды прохождения будет изучена в следующем разделе.

6. ТУННЕЛИРОВАНИЕ

Чтобы прояснить особенности туннелирования для критического режима, исследуем структуру матрицы рассеяния для случая, когда энергия туннелирующего электрона совпадает с энергией локализованного состояния в канале. Однако сперва рассмотрим более общую ситуацию, когда для электрона, распространяющегося в канале с $n = 1$, энергия лежит в интервале $E_1 < E < E_2$. Уравнение Шредингера (6) для $x < -L/2$ имеет решение

$$\psi_1 = A_1 \exp \left[ik_1 \left(x + \frac{L}{2} \right) \right] + B_1 \exp \left[-ik_1 \left(x + \frac{L}{2} \right) \right], \quad \psi_2 = B_2 \exp \left[|k_2| \left(x + \frac{L}{2} \right) \right]. \quad (56)$$

В области между примесями, $-L/2 < x < L/2$, решение есть

$$\psi_1 = a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x), \quad \psi_2 = a_2 \exp(-|k_2|x) + b_2 \exp(|k_2|x), \quad (57)$$

а для $L/2 < x$ решение запишем в виде

$$\psi_1 = C_1 \exp \left[ik_1 \left(x - \frac{L}{2} \right) \right], \quad \psi_2 = C_2 \exp \left[-|k_2| \left(x - \frac{L}{2} \right) \right]. \quad (58)$$

(Для упрощения записи следующих ниже формул здесь мы переопределили фазы падающих и рассеянных волн.) После подстановки решений (56)–(58) в граничные условия, найдем уравнения для амплитуд:

$$(ik_1 + v_{11}) \exp(-i\theta_1)a_1 + v_{11} \exp(i\theta_1)b_1 + v_{12} [\exp(|\theta_2|)a_2 + \exp(-|\theta_2|)b_2] = ik_1 A_1, \quad (59)$$

$$(-|k_2| + v_{22}) \exp(|\theta_2|)a_2 + v_{22} \exp(-|\theta_2|)b_2 + v_{12} [\exp(-i\theta_1)a_1 + \exp(i\theta_1)b_1] = 0, \quad (60)$$

$$ik_1 \exp(i\theta_1)a_1 - (ik_1 + v_{11})C_1 - v_{12}C_2 = 0, \quad (61)$$

$$|k_2| \exp(-|\theta_2|)a_2 + (-|k_2| + v_{22})C_2 + v_{12}C_1 = 0, \quad (62)$$

$$ik_1 \exp(-i\theta_1)b_1 + v_{11}C_1 + v_{12}C_2 = 0, \quad (63)$$

$$-|k_2| \exp(|\theta_2|)b_2 + v_{12}C_1 + v_{22}C_2 = 0, \quad (64)$$

где $\theta_1 = k_1 L/2$ и $\theta_2 = k_2 L/2$. Теперь изучим ситуацию, когда выполнены условия локализации. Ниже мы рассмотрим подробно только симметричный случай. Как было показано выше, критические параметры $(E(j), L(j))$ находятся из выражений

$$\begin{aligned} [\exp(i\theta_1) + \exp(-i\theta_1)] &= 0, \\ (-|k_2| + v_{22}) [\exp(|\theta_2|) + \exp(-|\theta_2|)] + |k_2| \exp(|\theta_2|) &= 0. \end{aligned} \quad (65)$$

Подставляя (65) в (59) и (60) и принимая во внимание (61)–(64), нетрудно проверить, что (60) выполняется тождественно. При этих условиях уравнение (59) дает

$$\begin{aligned} -(ik_1 + v_{11})C_1 + v_{12}C_2 - v_{11}C_1 - v_{12}C_2 + 2(v_{12}^2/|k_2|) \operatorname{sh}(|\theta_2|)C_1 &= \\ = -[ik_1 + 2v_{11} - v_{22} + 2(v_{12}^2/|k_2|) \operatorname{sh}(|\theta_2|)] C_1 = ik_1 A_1. \end{aligned} \quad (66)$$

Важно отметить, что амплитуды C_2 не содержатся в (66). Таким образом, амплитуда t_{11} записывается как

$$t_{11}(E(j)) = \frac{-ik_1}{ik_1 + 2v_{11} - (2v_{12}^2/|k_2|) \operatorname{sh}(|\theta_2|)}. \quad (67)$$

В этом случае падающая волна $A_1 \exp[ik_1(E(j))x]$ с энергией, совпадающей с энергией локализованного состояния $E(j)$ в волноводе, имеет конечную амплитуду и конечную вероятность прохождения через структуру, а прозрачность квантового волновода претерпевает качественное изменение, поскольку нуль и резонанс исчезают.

Теперь покажем, что для той же самой энергии $E(j)$ можно найти другое решение уравнений (59)–(64). Если выбрать амплитуду $A_1 = 0$ в (59)–(64), то из (66) следует, что $C_1 = 0$. Тогда из (61)–(64) найдем, что $a_1 = b_1$ и $a_2 = b_2$. Это решение в точности совпадает с симметричным локализованным состоянием (51). Итак, мы показали, что уравнения (59)–(64) дают два типа решений для критических параметров: а) распространяющиеся волны, проходящие через систему, и б) локализованные состояния внутри системы. Формально это явление связано с вырождением системы уравнений для амплитуд при критических параметрах. Важно отметить, что волновые функции вырожденных состояний принадлежат разному типу состояний: локализованным и распространяющимся. Как известно, электронные состояния в реалистическом потенциальном поле принадлежат либо дискретным уровням с квадратично интегрируемой волновой функцией, либо уровням континуума, для которых волновые функции

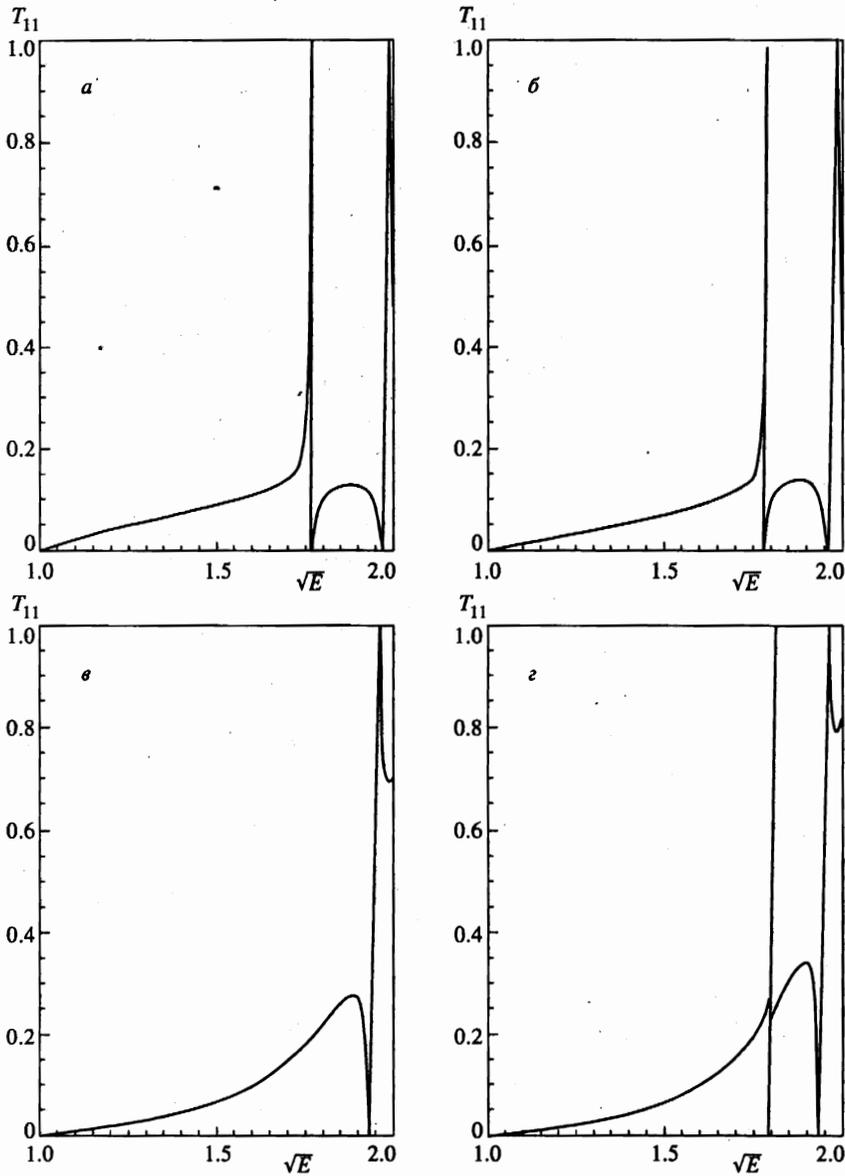


Рис. 6. Коэффициент прохождения T_{11} как функция энергии E (в единицах E_1) при различных значениях L (в единицах v_{22}^{-1}): $a - L = 1.26$; $б - L = 1.41$; $в - L = 1.613$; $г - L = 1.73$

ненормируемы. Обычно эти состояния отделены вполне определенной энергией — краем подвижности. В рассматриваемой системе дискретные и распространяющиеся состояния имеют одинаковую энергию, т. е. реализуется случай вырождения состояний, принадлежащих разному классу функций.

Для иллюстрации эффекта, связанного с исчезновением резонансов, мы изобра-

зили на рис. 6 прозрачность T_{11} как функцию энергии для различных расстояний: $L = 1.26, 1.41, 1.613$, и 1.73 (в качестве единицы длины использована величина v_{22}^{-1}), где расстояние $L(0) = 1.613$ связано с минимальным критическим расстоянием. Эволюция пары резонансов видна на рис. 4а и 4б. Результат показывает, что, когда L достигает критического значения $L(0)$, резонанс Фано исчезает. Прозрачность имеет конечное значение 0.2098 при энергии $E(0) = 3.1878$. Из рис. 4г видно, что резонансы появляются снова, когда расстояние превышает критическое.

7. МНОГОКАНАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Рассмотрим снова прохождение электрона через две примеси в канале, и пусть его энергия находится в интервале $E_1 < E < E_2$. Для симметричного случая матрица M_s определена согласно (33). Предположим, что параметры системы таковы, что в канале $n = 1$ имеется стоячая волна. Это означает, что примеси расположены на критическом расстоянии и мы имеем условие обращения в нуль ширины уровня: $\cos \theta_1 = 0$. Из структуры матрицы M_s следует, что равенство $\det M_s = 0$ выполнено, когда

$$\cos \theta_1 = 0, \quad D_{2,\infty} = 0, \quad (68)$$

где $D_{2,\infty}$ — детерминант матрицы, которая получается из M_s при вычеркивании первого столбца и первой строки. Из вида M_s следует, что все ее элементы, определяющие $D_{2,\infty}$, будут действительными, т. е. уравнения (68) могут иметь действительные решения.

Покажем это в трехканальном приближении. Из (68) находим

$$\cos \theta_1 = 0, \quad 2(v_{22} - |k_2|) \operatorname{ch} |\theta_2| + |k_2| \exp(-|\theta_2|) = 4v_{23}^2 \frac{\operatorname{ch} |\theta_2| \operatorname{ch} |\theta_3|}{2(v_{33} - |k_3|) \operatorname{ch} |\theta_3| + |k_3| \exp(-|\theta_3|)}. \quad (69)$$

Действуя по теории возмущений, в нулевом приближении имеем

$$2(v_{22} - |k_2|) \operatorname{ch} |\theta_2| + |k_2| \exp(-|\theta_2|) = 0. \quad (70)$$

Пусть E_0^0 — решение уравнения (70); поправка к решению этого уравнения находится из (69) и имеет вид $E_0 = E_0^0 + \delta E$, где

$$\delta E = 2 \frac{\hbar^2 v_{23}^2}{m} \frac{v_{22} \operatorname{ch} |\theta_3|}{2(v_{33} - |k_3|) \operatorname{ch} |\theta_3| + |k_3| \exp(-|\theta_3|)}. \quad (71)$$

Вычисление с учетом высших зон дает действительные слагаемые в правой части $D_{2,\infty}$ при разложении в ряд. Поскольку все слагаемые в этом разложении действительны, уровни могут сдвинуться только вдоль действительной оси. Мы видим, что в случае $E_1 < E < E_2$ всегда можно найти параметры, при которых имеются дискретные уровни.

Качественное различие следует ожидать в случае, когда энергия лежит вблизи границ высших зон. В разд. 3 для высших зон было показано, что совершенное отражение в общем случае отсутствует. Для двухпримесной проблемы также оказывается, что в рамках теории возмущений разложение детерминанта матрицы M_s содержит комплексные слагаемые, что приводит к сдвигу уровней в комплексную плоскость энергии. В качестве примера исследуем интервал $E_2 < E < E_3$. Сохраняя вклады $\sim v_{n,n'}^2$, разложим $\det M_s$ в ряд и перепишем $\det M_s = 0$ как

$$2(v_{33} - |k_3|) \operatorname{ch} |\theta_3| + |k_3| \exp(-|\theta_3|) = \\ = 4v_{13}^2 \frac{\cos \theta_1 \operatorname{ch} |\theta_3|}{2(v_{11} + ik_1) \cos \theta_1 - ik_1 \exp(i\theta_1)} + 4v_{23}^2 \frac{\cos \theta_2 \operatorname{ch} |\theta_3|}{2(v_{22} + ik_2) \cos \theta_2 - ik_2 \exp(i\theta_2)}. \quad (72)$$

Анализ правой части выражения (72) показывает, что решение для действительной энергии возможно, если

$$k_1 v_{13}^2 \cos^2 \theta_1 + k_2 v_{23}^2 \cos^2 \theta_2 = 0. \quad (73)$$

Это может произойти, только когда либо $\cos^2 \theta_1 = 0$, либо $\cos^2 \theta_2 = 0$. Пусть выполнено $\cos^2 \theta_1 = 0$. В этом случае из (72) можно найти комплексное решение в форме $E = E^0 + \delta E - i\Gamma$, где E^0 находится из

$$2(v_{33} - |k_3|) \operatorname{ch} |\theta_3| + |k_3| \exp(-|\theta_3|) = 0, \quad (74)$$

а ширина уровней Γ записывается в виде

$$\Gamma = 2 \frac{\hbar^2 v_{23}^2}{m} \frac{k_2 v_{22} \cos^2 \theta_2}{k_2^2 + 4v_{22}^2 \cos^2 \theta_2 + 4v_{22} k_2 \sin \theta_2 \cos \theta_2}. \quad (75)$$

Заметим, что поправка δE имеет подобную же структуру. Таким образом, мы имеем резонансное состояние в подзоне $n = 3$, которое распадается в подзону $n = 2$. При этих условиях в подзоне $n = 1$ существует стоячая волна. Нетрудно выполнить подобный анализ вблизи высоколежащих зон и получить характеристики резонансов.

8. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Таким образом, мы изучили новые когерентные эффекты в квантовом волноводе с двумя притягивающими примесями. Для пары примесей показано, что взаимодействие резонансов Фано может приводить к качественному изменению амплитуды прохождения. Следствием этого взаимодействия может быть появление дискретных уровней в континууме. Сформулирована и решена двухпараметрическая спектральная задача для определения параметров системы, при которых происходит исчезновение резонансов и появление дискретных уровней. Исследовано туннелирование через дискретные уровни и найдено, что вероятность прохождения электрона через волновод конечна, когда он имеет энергию, совпадающую с энергией дискретного уровня. Как было показано, это явление есть следствие вырождения системы уравнений, определяющих амплитуды рассеяния в многоканальной системе для критических параметров. При этом возможны два типа волновых функций для критических параметров: локализованных и распространяющихся. Это объясняется тем, что можно приготовить два различных типа состояний с одной и той же энергией путем различного выбора граничных условий.

В последнее время методами современной нанотехнологии было показано, что в квантовых каналах могут быть созданы искусственные примеси [28, 29] с заданными параметрами. Используя приведенные в таблице результаты, нетрудно получить оценку наименьших критических параметров канала шириной W : $E(0) = 3.18E_1$ и $L(0) = 0.41W$, где $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mW^2$. Например, если рассмотреть двумерный канал на основе структуры $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ шириной $W = 300$ нм, то для такой структуры минимальное критическое расстояние между примесями оценивается как $L(0) \sim 120$ нм,

а минимальная критическая энергия $E(0) \sim 16$ мэВ.

Мы благодарим Ю. С. Джое (Yong S. Joe) за полезные дискуссии. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 97-02-16923а), KOSEF, исследовательским фондом CNU и Министерством образования Кореи (грант № BSRI-97-2431).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Здесь вычислены матричные элементы $V_{n,n'}$ и параметры $v_{n,n'}$ примеси в квантовом канале. Для описания примеси использована модель, которая предложена в работах [18, 19]. Пусть примесный потенциал описывается выражением

$$V(x - X_s, y - Y_s) = -V_{att} f(x - X_s) g(y - Y_s), \quad (76)$$

где функции $f(x)$ и $g(y)$ определены равенствами

$$\begin{aligned} f(x) &= 1, & |x| \leq L_a, & & f(x) &= 0, & |x| > L_a, \\ g(y) &= 1, & |y| \leq W_a, & & g(y) &= 0, & |y| > W_a, \end{aligned} \quad (77)$$

X_s, Y_s — координаты центра примесного потенциала; L_a, W_a — размеры ямы, V_{att} — глубина ямы. Для численных расчетов и оценок в качестве модели потенциала конфайнмента используется модель бесконечно глубокой ямы. В этом случае можно записать решение уравнения (4) в виде

$$\varphi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin \left[\pi n \left(\frac{y}{W} + \frac{1}{2} \right) \right], \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mW^2}, \quad (78)$$

где W — ширина волновода. Используя волновые функции (78), легко вычислить матричные элементы примесного потенциала (76):

$$V_{n,n'}(x - X_s) = -2V_{att} f(x - X_s) g_{n,n'}(w, y_s), \quad (79)$$

где диагональные элементы определены выражением

$$g_{n,n} = \frac{1}{2\pi} \left[w - \frac{1}{n} \sin(nw) \cos(2ny_s) \right], \quad (80)$$

а недиагональные ($n \neq n'$) элементы имеют вид

$$\begin{aligned} g_{n,n'} &= \frac{1}{\pi(n - n')} \sin \left[(n - n') \frac{w}{2} \right] \cos [(n - n') y_s] - \\ &- \frac{1}{\pi(n + n')} \sin \left[(n + n') \frac{w}{2} \right] \cos [(n + n') y_s], \end{aligned} \quad (81)$$

где

$$w = \pi \frac{W_a}{W}, \quad y_s = \pi \left(\frac{Y_s}{W} + \frac{1}{2} \right). \quad (82)$$

Отметим, что матричные элементы (79) быстро убывают в зависимости от разности $|n - n'|$, тогда как для модели, которая изучалась в [8], они постоянны.

Если длина волны электрона λ_n в открытом канале n будет много больше чем L_a , т. е.

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} \gg L_a, \quad (83)$$

то для описания распространения волны вдоль волновода применима модель короткодействующего потенциала. Тогда функция $f(x)$ может быть записана как

$$f(x) \approx L_a \delta(x). \quad (84)$$

Как следует из (83), аппроксимация (84) будет корректной, когда

$$|E - E_n| \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_a^2}. \quad (85)$$

Теперь можно переписать матричные элементы как

$$V_{n,n'}(x - X_s) = -2V_{att} L_a \delta(x - X_s) g_{n,n'}(w, y_s). \quad (86)$$

Используя обозначение

$$v_{n,n'} = \frac{2m}{\hbar^2} V_{att} L_a g_{n,n'}(w, y_s), \quad (87)$$

перепишем (86) в виде (10). Для численного моделирования использовались безразмерные параметры

$$\bar{V}_{att} = \frac{V_{att}}{E_1}, \quad \bar{v}_{n,n'} = \frac{W}{\pi} v_{n,n'}, \quad \gamma = \pi \frac{L_a}{W}, \quad \bar{v}_{n,n'} = \gamma \bar{V}_{att} g_{n,n'} \quad (88)$$

и следующие параметры примесей:

$$L_a = 0.5W, \quad W_a = 0.5W, \quad V_{att} = 5E_1,$$

а также $E_1 = \hbar^2 k_1^2 / 2m$ в качестве единицы энергии.

Литература

1. *Quantum Transport in Ultrasmall Devices*, Vol. 342 of NATO Advanced Study Institute, Ser. B: Physics, ed. by D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni, and A.-P. Jauho, Plenum, New York (1995).
2. R. Landauer, *Phil. Mag.* **21**, 863 (1970).
3. M. Buttiker, *Phys. Rev. B* **35**, 4123 (1987).
4. P. L. McEuen, B. M. Alphenaar, R. G. Weeler, and R. N. Sack, *Surf. Sci.* **229**, 312 (1990).
5. M. W. Dellow, P. H. Beton, C. J. G. Langerak et al., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1754 (1992).
6. C.-T. Liang, I. M. Castelton, J. E. F. Frost et al., *Phys. Rev. B* **55**, 6723 (1997).
7. C. S. Chu and R. S. Sorbello, *Phys. Rev. B* **40**, 5941 (1989).
8. P. F. Bagwell, *Phys. Rev. B* **41**, 10354 (1990).
9. E. Tekman and S. Ciraci, *Phys. Rev. B* **42**, 9098 (1990).
10. A. Kumar and P. F. Bagwell, *Phys. Rev. B* **43**, 9012 (1991).

11. A. Kumar and P. F. Bagwell, Phys. Rev. B **46**, 1747 (1992).
12. W. Porod, Zhi-an Shao, and C. S. Leng, Appl. Phys. Lett. **61**, 1350 (1992).
13. P. F. Bagwell and R. K. Lake, Phys. Rev. B **46**, 15329 (1992).
14. S. A. Gurvitz and Y. B. Levinson, Phys. Rev. B **47**, 10578 (1993).
15. E. Tekman and P. F. Bagwell, Phys. Rev. B **48**, 2553 (1993).
16. P. J. Price, Phys. Rev. B **48**, 17301 (1993).
17. J. U. Nöckel and A. Douglas Stone, Phys. Rev. B **50**, 17415 (1994).
18. Yong S. Joe and R. M. Cosby, Appl. Phys. Lett. **81**, 6217 (1997).
19. Yong S. Joe and R. M. Cosby, Sol. St. Comm. **101**, 731 (1997).
20. U. Fano, Phys. Rev. **104**, 1866 (1961).
21. J. von Neumann and E. Wigner, Z. Phys. **30**, 465 (1929).
22. L. Fonda and R. G. Newton, Ann. Phys. (N.Y.), **10**, 490 (1960).
23. F. H. Stillinger and D. R. Herrick, Phys. Rev. A **11**, 446 (1975).
24. H. Friedrich and D. Wintgen, Phys. Rev. A **31**, 3964 (1985).
25. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
26. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (Нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (1989).
27. Ф. Р. Гантмахер, *Теория матриц*, Наука, Москва (1967).
28. Syoji Yamada and Masafumi Yamamoto, Appl. Phys. Lett. **79**, 8391 (1996).
29. T. Lindberg, J. E. F. Frost, K-F. Berggren et al., Semicond. Sci. Technol. **12**, 875 (1997).