

напрямку та величини магнітного поля. Для оцінки даних механізмів СТР проведено чисельний розрахунок часу релаксації для реальної моделі ґратки кристала дейтеронафталіну, який базується на методах атом — атом-потенціалів та молекулярних орбіталей.

V. A. Andreev, Yu. I. Prilutsky

SPIN-LATTICE RELAXATION
IN THE TRIPLET EXCITED STATES OF ORGANIC MOLECULAR CRYSTALS.
NON-INTERACTING IMPURITY MOLECULES

S u m m a r y

The low-temperature spin-lattice relaxation mechanisms conditioned by the relation of translational and rotational motions of molecules as well as translational motions of molecules and intermolecular vibrations of nuclei have been studied. General expressions of the spin-lattice relaxation probabilities have been obtained for the direct one-phonon processes depending on the temperature, magnetic field direction and magnitude. The numerical calculation of spin-lattice relaxation time for the real model of deuterionaphthalene crystal is carried out using the methods of atom-atom potential and molecular orbitals.

УДК 530.145

© 1993 г.

Ю. А. Клименко, Л. И. Малышева¹, А. И. Онипко¹

КВАНТОВЫЙ ТРАНСПОРТ ЭЛЕКТРОНОВ
В ДВУМЕРНОМ ПРЯМОМ УГЛЕ

Впервые получено точное решение задачи рассеяния для двумерной модели прямого угла, позволяющее эффективно определять характеристики баллистического электронного транспорта в прямоугольных соединениях квантовых каналов. С помощью предложенной рекуррентной процедуры найдены энергии связанных состояний, помодовые и усредненные коэффициенты отражения и прохождения электронов, движущихся в прямоугольном канале в баллистическом режиме. С точки зрения практических приложений определены фильтрующие и проводящие свойства таких структур.

Введение

Проблема квантового электронного транспорта в двумерных наноструктурах привлекла в последние годы пристальное внимание исследователей [1—10] как с точки зрения широкого спектра практических приложений, так и по причине открытия ряда новых эффектов (существование связанных состояний для свободного в классическом смысле электрона, квантовой интерференции электронных волн и др.). Мощный импульс таким исследованиям придают также новые возможности современной нанотехнологии в получении латеральных структур на основе соединений GaAs — Al_xGa_{1-x}As, обладающих высокой подвижностью носителей тока, что позволяет надеяться на проявление квантовых эффектов в сверхчувствительных нанометровых приборах. Ввиду возможного практического применения в цитируемых и других работах по данной тематике изучались свойства баллистического транспорта электронов через структуры с различной пространственной конфигурацией.

Проблема электронного рассеяния в таких системах носит обычно вычислительный характер, так как нарушения непрерывности квантовых каналов (изгибы, сужения, соединения и пересечения каналов) приводят к перемешиванию большого числа электронных мод, и процедура получения решений в [2, 4—6] была полностью вычислительной. В работах [1, 7, 8] использованы подходящие аналитические формы для нахождения волновой функции электронов в области рассеяния, упрощающие организацию численного эксперимента. В [9, 10] уравнения для амплитуд рассеяния (в "кресте", т.е. в X-образной струк-

туре) получены в простой аналитической форме, послужившей отправной точкой для компьютерных вычислений.

В данной работе проведено дальнейшее развитие предложенного в [10] подхода, а именно получены достаточно удобные канонические уравнения для матрицы рассеяния электронов в прямоугольном соединении квантовых каналов в дискретной и непрерывной моделях описания. Предложенный нами метод позволяет посредством простой рекуррентной процедуры отыскивать аналитические зависимости для характеристик рассеяния электронов. Следует также отметить, что предложенный нами подход без труда обобщается на случай системы с произвольной последовательностью различных прямоугольных соединений и пересечений квантовых каналов, причиной же выбора именно L -образной структуры послужило ее возможное применение в перспективных нанозлектронных сетях.

1. Постановка задачи и основные уравнения

Для описания процесса переноса электронов через прямой угол в баллистическом режиме воспользуемся стационарным уравнением Шредингера $H\Psi = E\Psi$ с гамильтонианом в приближении сильной связи

$$H = -4L \sum_{\mathbf{R}} a_{\mathbf{R}}^{-} a_{\mathbf{R}} + L \sum_{\mathbf{R}, \delta\mathbf{R}} a_{\mathbf{R}}^{+} a_{\mathbf{R}+\delta\mathbf{R}} \quad (1)$$

и волновой функцией

$$\Psi = \sum_{\mathbf{R}=(m,n)} \Psi_{\mathbf{R}} a_{\mathbf{R}}^{-} |0\rangle. \quad (2)$$

В (1), (2) $a_{\mathbf{R}}^{+}$, $a_{\mathbf{R}}^{-}$ — операторы рождения и уничтожения электрона на узле \mathbf{R} с целочисленными координатами (m, n) , $\delta\mathbf{R}$ соединяет узел \mathbf{R} с его ближайшими соседями, L — интеграл перекрытия волновых функций электрона на соседних узлах. Полагая энергию электрона на отдельном узле равной $-4L$ с $L = -\hbar^2 / (2m^* a^2)$, a —

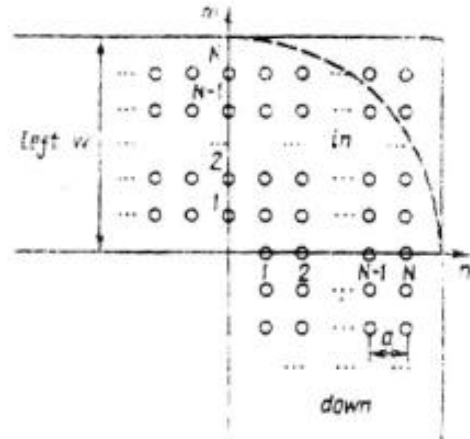


Рис.1. Схематическое изображение L -образного двумерного электронного канала. Координаты узлов решетки m и n в единицах a изменяются от $-\infty$ до N . Сплошными линиями показаны границы канала в континуальном пределе ($N \rightarrow \infty$, $Na = \text{const}$), когда $w = (N + 1)a$ — ширина канала. Штриховая кривая — скругленный угол с нулевым внутренним радиусом и внешним радиусом, равным w .

постоянная решетки, m^* — эффективная масса электрона, получим в континуальном пределе ($N \rightarrow \infty$, $Na = \text{const}$) полную эквивалентность рассматриваемой модели приближению эффективной массы [10].

Для нахождения волновой функции (2) разобьем множество узлов рассматриваемой структуры на три области: left, in и down (см. рис.1) со следующей нумерацией узлов решетки \mathbf{R} : $1 \leq m \leq N$, $n \leq 0$ в области left, $m \leq 0$, $1 \leq n \leq N$ в области down и $1 \leq m \leq N$, $1 \leq n \leq N$ в области in. В каждой из этих областей коэффициенты разложения волновой функции $\Psi_{\mathbf{R}}$ удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} \frac{E + 4L}{L} \Psi_{m,n} = & \Psi_{m-1,n}(1 - \delta_{m,1}) + \Psi_{m+1,n}(1 - \delta_{m,N}) + \\ & + \Psi_{m,n-1} + \Psi_{m,n+1}, \quad 1 \leq m \leq N, \quad n \leq 0, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{E + 4L}{L} \Psi_{m,n} = \Psi_{m-1,n} + \Psi_{m+1,n} + \Psi_{m,n-1}(1 - \delta_{n,1}) + \Psi_{m,n+1}(1 - \delta_{n,N}), \quad m \leq 0, \quad 1 \leq n \leq N, \quad (4)$$

$$\frac{E + 4L}{L} \Psi_{m,n} = \Psi_{m-1,n} + \Psi_{m+1,n}(1 - \delta_{m,N}) + \Psi_{m,n-1} + \Psi_{m,n+1}(1 - \delta_{n,N}), \quad 1 \leq m \leq N, \quad 1 \leq n \leq N. \quad (5)$$

Решения уравнений (3), (4), описывающие падающую и отраженную волны в канале left и прошедшую волну в канале down, будем искать в виде

$$\Psi_{m,n}^l = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{j=1}^N [\delta_{j,j_0} \exp(ik_j n) + r_{k_j, k_{j_0}} \exp(-ik_j n)] \sin(\chi_j m), \quad (6)$$

$$\Psi_{m,n}^d = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{j=1}^N t_{k_j, k_{j_0}} \exp(-ik_j m) \sin(\chi_j n). \quad (7)$$

Здесь $\chi_j = \pi j / (N + 1)$ — квантовые числа поперечного движения электронов в канале, k_j — безразмерный продольный волновой вектор электрона, отвечающий j -й моде. Видно, что коэффициенты (6) и (7) удовлетворяют уравнениям (3) и (4) для всех узлов областей left и down, за исключением граничных узлов $1 \leq m \leq N, n = 0$ и $m = 0, 1 \leq n \leq N$.

Энергия электронов в системе определяется волновым вектором k_{j_0} и номером поперечной моды j_0 падающего потока:

$$E = 2L (\cos \chi_{j_0} + \cos k_{j_0} - 2), \quad (8)$$

а величины k_j в (6), (7) удовлетворяют закону сохранения энергии

$$\cos k_{j_0} + \cos \chi_{j_0} = \cos k_j + \cos \chi_j. \quad (9)$$

Отметим, что корни уравнения (9) могут быть как вещественными, так и мнимыми, т.е. выражения (6) и (7) учитывают вклад как распространяющихся, так и затухающих волн во входном и выходном каналах.

В области in пересечения каналов left и down функции $\Psi_{m,n}^{\text{in}}$ также можно искать в виде разложения по функциям $\sin(\chi_j m), \sin(\chi_j n)$, а для определения коэффициентов разложения использовать уравнение (5) для граничных узлов области пересечения in. Такой способ определения неизвестных коэффициентов разложения подобен методу сшивки, которым обычно пользуются при решении задачи рассеяния в континуальной модели. Более общее описание электронного транспорта в прямоугольных пересечениях и соединениях каналов дает метод функций Грина, использованный в [10].

Для вывода системы уравнений, которым удовлетворяют амплитуды отраженной и прошедшей волн $r_{k_j, k_{j_0}}$ и $t_{k_j, k_{j_0}}$, необходимо подставить функции $\Psi_{m,n}^{\text{in}}$ в уравнения (3), (4) для граничных узлов $1 \leq m \leq N, n = 0$ и $m = 0, 1 \leq n \leq N$ областей left и down. Опуская промежуточные выкладки, приведем окончательный результат:

$$Z \bar{r}_{k_j, k_{j_0}} = -2i \sin k_j \delta_{j,j_0} + \sum_{j'=1}^N G_{jj'} t_{k_{j'}, k_{j_0}}, \quad (10a)$$

$$Z_j t_{k_j, k_{j_0}} = \sum_{j'=1}^N G_{jj'} \bar{r}_{k_{j'}, k_{j_0}}, \quad (106)$$

где

$$\bar{r}_{k_{j'}, k_{j_0}} = \delta_{jj_0} + r_{k_{j'}, k_{j_0}}, \quad (11)$$

$$Z_j = \frac{\sin k_j \exp[-i(N+1)k_j]}{\sin[(N+1)k_j]}, \quad G_{jj'} = \frac{1}{N+1} \frac{\sin \chi_j \sin \chi_{j'}}{\cos k_j - \cos \chi_{j'}}. \quad (12)$$

В континуальном пределе $N \rightarrow \infty$, $Na = \text{const}$ получим систему уравнений для непрерывной модели, аналогичную (10а), (10б), при этом естественно перейти от k_j к новому волновому вектору $q_j = k_j / (ak_{\text{th}})$, $k_{\text{th}} = \pi/w$ — волновой вектор порога прохождения электронов в канале, w — ширина канала. Более детальное описание перехода к континуальному пределу дано в [10].

При введении новых переменных

$$X_{k_j, k_{j_0}}^{\pm} = \bar{r}_{k_j, k_{j_0}} \pm t_{k_j, k_{j_0}} \quad (13)$$

уравнения (10) приобретают более удобный вид:

$$Z_j X_{k_j, k_{j_0}}^{\pm} = F_{jj_0} \pm \sum_{j'=1}^N G_{jj'} X_{k_{j'}, k_{j_0}}^{\pm} \quad (14)$$

или в матричной записи

$$S^{\pm} X^{\pm} = F, \quad (15)$$

где $S_{jj'}^{\pm} = Z_j \delta_{jj'} \mp G_{jj'}$, $X^{\pm} = \text{col}(X_{k_1, k_{j_0}}^{\pm}, \dots, X_{k_N, k_{j_0}}^{\pm})$, а F — вектор-столбец с единственной ненулевой компонентой на j_0 -м месте, $F_{jj_0} = -2i \sin k_{j_0} \delta_{jj_0}$.

Уравнения (14) можно преобразовать к треугольной форме

$$\tilde{Z}_j^{\pm} X_{k_j, k_{j_0}}^{\pm} = \tilde{F}_{jj_0}^{\pm} \pm \sum_{j'=1}^{j-1} \tilde{G}_{jj'}^{\pm} X_{k_{j'}, k_{j_0}}^{\pm}, \quad (16)$$

воспользовавшись следующей рекуррентной процедурой:

$$\tilde{G}_{jj'}^{\pm} = G_{jj'} \pm \sum_{j''=\max(j, j')+1}^N \frac{\tilde{G}_{jj''}^{\pm} \tilde{G}_{j''j'}^{\pm}}{\tilde{Z}_{j''}^{\pm}}, \quad (17)$$

$$\tilde{Z}_j^{\pm} = Z_j \mp G_{jj} - \sum_{j'=j+1}^N \frac{(\tilde{G}_{jj'}^{\pm})^2}{\tilde{Z}_{j'}^{\pm}}, \quad (18)$$

$$\tilde{F}_{jj_0}^{\pm} = -2i \sin k_{j_0} \delta_{jj_0} + \sum_{j'=j+1}^N \frac{\tilde{G}_{jj'}^{\pm} \tilde{F}_{j'j_0}^{\pm}}{\tilde{Z}_{j'}^{\pm}}. \quad (19)$$

Таким образом, задача получения решения уравнений для S -матрицы рассеяния сведена к простой рекуррентной процедуре (16) — (19).

Отметим, что вектор-столбец \tilde{F}^{\pm} имеет j_0 ненулевых компонент ($\tilde{F}_{j_0}^{\pm} \neq 0$ для $j \leq j_0$), поэтому выражения для амплитуд рассеяния $r_{k_j, k_{j_0}}$ и $t_{k_j, k_{j_0}}$

$$\begin{Bmatrix} r_{k_j, k_{j_0}} \\ t_{k_j, k_{j_0}} \end{Bmatrix} = \frac{1}{2} \left(X_{k_j, k_{j_0}}^+ \pm X_{k_j, k_{j_0}}^- \right) - \begin{Bmatrix} \delta_{j/j_0} \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (20)$$

при прохождении в системе фундаментальной ($j_0 = 1$) и нижайших мод имеют особенно простой вид.

Таким образом, уравнения (16) определяют рекуррентную процедуру нахождения точных решений для амплитуд рассеяния. Использование (16) совместно с (10) и (15) позволяет непосредственно получить все необходимые характеристики баллистического транспорта электронной волны через прямой угол.

2. Основные результаты

2.1. Общие свойства вероятностей рассеяния. Одним из преимуществ представления уравнений для амплитуд рассеяния в каноническом виде (10) является возможность установления ряда свойств вероятностей рассеяния

$$\begin{Bmatrix} R_{j, j_0} \\ T_{j, j_0} \end{Bmatrix} = \frac{\sin k_j}{\sin k_{j_0}} \begin{Bmatrix} |r_{k_j, k_{j_0}}|^2 \\ |t_{k_j, k_{j_0}}|^2 \end{Bmatrix} \quad (21)$$

без получения явного вида решения системы (10). Ниже сформулированы некоторые свойства вероятностей рассеяния электронной волны, характерные для квантовой системы произвольной геометрии, а также указаны особенности процесса рассеяния электронов в прямоугольном канале.

Прежде всего покажем, что вероятности рассеяния удовлетворяют закону сохранения полного потока

$$\sum_{j=1}^{N_0} (R_{j, j_0} + T_{j, j_0}) = 1 \quad (22)$$

для любых значений j_0 (N_0 в (22) есть число вещественных корней уравнения (9) при фиксированных параметрах χ_{j_0} и k_{j_0} падающей электронной волны; иными словами, N_0 определяет общее количество незатухающих электронных мод, отвечающих одной и той же энергии E). В самом деле, умножим уравнения (10а) на $\bar{r}_{k_j, k_{j_0}}^*$, а уравнения, комплексно сопряженные (10б), на $t_{k_j, k_{j_0}}$. Затем вычтем из первых уравнений вторые, а результат просуммируем по j от 1 до N . Тогда

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_0} \{ Z_j |\bar{r}_{k_j, k_{j_0}}|^2 - Z_j^* |t_{k_j, k_{j_0}}|^2 \} + \\ & + \sum_{j=N_0+1}^N Z_j \{ |\bar{r}_{k_j, k_{j_0}}|^2 - |t_{k_j, k_{j_0}}|^2 \} = -2i \sin k_{j_0} \bar{r}_{k_{j_0}, k_{j_0}}^* \end{aligned} \quad (23)$$

Соотношение (22) непосредственно следует из уравнения для мнимой части (23) с использованием тождеств $\text{Im } Z_j = -\sin k_j$, $|r_{k_j, k_{j_0}}|^2 = |\bar{r}_{k_j, k_{j_0}}|^2 - 2\delta_{j j_0} \text{Re } \bar{r}_{k_j, k_{j_0}}^* - \delta_{j j_0}$.

Подчеркнем, что равенство (22) остается справедливым и при приближенном N -модовом описании системы, если только $N > N_0$.

Второе свойство связано с симметрией вероятностей рассеяния $R_{j j_0}$ и $T_{j j_0}$ по индексам. Действительно, из уравнений (15) по правилу Крамера имеем

$$X_{k_j, k_{j_0}}^\pm = (-1)^{j+j_0+1} 2i \sin k_{j_0} \frac{S_{j j_0}^\pm}{\|S^\pm\|}$$

где $S_{j j_0}^\pm$ — минор матрицы S^\pm , получаемый путем удаления j_0 -го столбца и j -й строки, $\| \cdot \|$ — детерминант матрицы. Тогда с учетом (11), (20) и (21) можно записать

$$\begin{Bmatrix} R_{j j_0} \\ T_{j j_0} \end{Bmatrix} = \frac{\sin k_j}{\sin k_{j_0}} \left| i \sin k_{j_0} \left[\frac{S_{j j_0}^+}{\|S^+\|} \pm \frac{S_{j j_0}^-}{\|S^-\|} \right] - \begin{Bmatrix} \delta_{j j_0} \\ 0 \end{Bmatrix} \right|^2,$$

откуда с учетом симметричности матриц S^\pm получим равенство

$$R_{j j_0} = R_{j_0 j}, \quad T_{j j_0} = T_{j_0 j} \quad (24)$$

Таким образом, вероятности отражения и прохождения по моде j падающей волны с поперечной модой j_0 совпадают с соответствующими вероятностями трансформации в моду j_0 падающей электронной волны с поперечной модой j .

Особенности поведения вероятностей рассеяния в пределе $k_{j_0} \rightarrow 0$ можно также определить непосредственно из уравнений (10а), (10б). В этом случае система (10а), (10б) становится однородной с неравным нулю детерминантом и, значит, $t_{k_j, k_{j_0}} = 0$, $r_{k_j, k_{j_0}} = -\delta_{j j_0}$, т.е. все вероятности рассеяния равны нулю, за исключением $R_{j_0 j_0} = 1$.

Аналогичные сформулированным выше свойства вероятностей рассеяния могут быть доказаны и для иных конфигураций прямоугольных пересечений и соединений квантовых каналов. Важной особенностью рассеяния в прямом угле является существование точного нуля вероятности прохождения в первой энергетической подзоне

$$\cos \frac{2\pi}{N+1} - 1 \leq \frac{E}{2L} \leq \cos \frac{\pi}{N+1} - 1, \quad (25)$$

показанное численным методом в [7], в отличие от X - [1] и T -образных структур [4], где этот эффект не наблюдается. Представление уравнений для амплитуд рассеяния в виде (15) позволяет предсказать возможность существования этого квантово-интерференционного эффекта, не прибегая к численным расчетам. Действительно, в энергетическом интервале (25) единственной комплексной величиной в матрицах S^\pm является Z_1 и, следовательно, миноры S_{11}^\pm вещественны. С другой стороны,

$$\|S^\pm\| = (Z_1 \mp G_{11}) S_{11}^\pm + \sum_{j=2}^N \pm (-1)^j S_{1j}^\pm G_{1j}$$

т.е. уравнение $X_{11}^+ = X_{11}^-$ также вещественно и может иметь действительный корень в первой энергетической подзоне, что означает существование резонансного отражения ($T_{11} = 0$) при прохождении фундаментальной моды.

2.2. С в я з а н н ы е с о с т о я н и я. Интересным свойством структур с пересечениями и соединениями квантовых каналов является существование в них связанных электронных состояний, энергии которых меньше энергии дна непрерывного спектра в канале. Этот эффект, впервые обнаруженный в [1] путем численного эксперимента, является чисто квантовым, так как при классическом рассмотрении задачи для свободных электронов в канале нет связанных состояний. Энергия связанного состояния в [1] была рассчитана в приближении эффективной массы. Здесь мы рассмотрим аналогичную дискретную задачу, чтобы проследить изменение энергии связанного состояния в зависимости от числа N дискретных цепочек, образующих канал.

Кратко опишем процедуру поиска связанных состояний. Так как такие состояния однозначно определяются геометрией самой структуры, то в формулах (6)–(9) и уравнениях (10) мы должны положить $\delta_{j,j_0} = 0$ (падающий поток отсутствует) и заменить $k_j \rightarrow ik_j$. (В этом случае мы отслеживаем все энергии, лежащие вне непрерывного спектра системы.) Тогда зависимости (6), (7) будут описывать искомую волновую функцию электрона, убывающую вглубь каналов left ($n \rightarrow -\infty$) и down ($m \rightarrow -\infty$), а система (10) задаст связь между ее амплитудами. Условием разрешимости последней является обращение в нуль ее детерминанта. Если такой нуль существует (один или несколько), то отсюда находится соответствующее значение k_1 , а по формулам (8) и (9) восстанавливается искомая энергия связанного состояния структуры.

Таким образом, отличительной особенностью связанного состояния является локализация волновой функции электрона в ограниченной области, где происходит нарушение пространственной однородности структуры. Иными словами, в этой области создаются предпосылки для возникновения локализованного электронного состояния, которое не может охватить всю структуру, так как его энергии недостаточно для "возбуждения" даже самой низкоэнергетической моды в канале.

Как видно из соотношений (16) и (20), энергетический спектр рассматриваемой системы определяется корнями уравнения

$$\tilde{Z}_1^+ \tilde{Z}_1^- = 0. \quad (26)$$

Следовательно, для определения энергии системы вне непрерывного спектра необходимо решить (26) при соответствующих заменах k_j на ik_j в выражениях (12). Энергию основного связанного состояния находим из (8), (9) ($L < 0$ — положительная эффективная масса)

$$E_b = 2 |L| (2 - \cos \chi_1 - \text{ch } k_b), \quad (27)$$

где k_b — корень уравнения (26) при указанной замене. В относительных единицах, отсчитываемых от дна первой зоны $E_{\text{th}} = E|_{k_1=0} = 2 |L| (1 - \cos \chi_1)$, можно записать

$$\Delta E_b = \frac{E_{\text{th}} - E_b}{E_{\text{th}}} = \frac{\text{ch } k_b - 1}{1 - \cos \chi_1} \quad (28)$$

или в континуальном пределе

$$\Delta E_b^{\zeta} = \left(\frac{k_b}{k_{\text{th}}} \right)^2. \quad (29)$$

В таблице приведены результаты расчета энергий основного состояния в дискретной (28) и непрерывной (29) моделях. Как следует из таблицы, разница в энергиях связанных состояний между дискретной и непрерывной моделями становится незначительной уже при сравнительно малых ширинах квантовых

каналов, $N = 10 + 20$. Заметим также, что в одномодовом приближении $\Delta E_b^c = 0,054$, а континуальный предел для двух-, трех- и четырехмодового приближений равен 0,063, 0,065, 0,067 соответственно, что иллюстрирует сходимость используемой вычислительной процедуры. Для "волнового вектора" основного состояния $k_b/k_{th} = \sqrt{E_b/E_{th}}$ мы получили 0,9646, что является уточнением значения 0,96 [1].

Покажем, что в континуальном пределе $N \rightarrow \infty$, $Na = \text{const}$ связанное состояние исчезает при $w \rightarrow \infty$. В самом деле, из таблицы следует

$$\Delta E_b^c = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_{th} - E_b}{E_{th}} = 0,0696.$$

С другой стороны, при $N \rightarrow \infty$ энергия дна фундаментальной зоны E_{th} стремится к нулю как $|L| \left(\frac{\pi}{N+1}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{w}\right)^2$. Таким образом, величина $E_{th} - E_b$ отщепления связанного состояния от края непрерывного спектра равна $0,0696 \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{w}\right)^2$ и стремится к нулю с увеличением ширины канала как w^{-2} . Заметим, что в противоположном пределе $w \rightarrow 0$ глубина связанного состояния стремится к бесконечности. Этот нефизический результат, являющийся следствием ограниченности континуального приближения, естественным образом исчезает в рамках дискретной модели.

2.3. Вероятности рассеяния. Обсуждение численных результатов. Как уже отмечалось, использование равенств (16)–(19) существенно упрощает организацию вычисления вероятностей рассеяния R_{j_0} и T_{j_0} . На приводимых на рис.2–4 графиках показаны характеристики рассеяния

электронов в прямоугольном канале как функции $q_1 = \frac{k_1}{k_{th}}$ (для континуальной модели). Наиболее детальное описание транспорта электронов через прямой угол дают зависимости R_{j_0} и T_{j_0} от волнового вектора k_{j_0} падающей волны.

Суммарная вероятность $T_{j_0} = \sum_{j=1}^{N_c} T_{j_0}$ прохождения электронной волны с $j_0 = 1$

была получена ранее [7] (штриховая линия на рис.2). Сплошными кривыми на рис.2, 3, 4 показаны вероятности рассеяния электрона из моды j_0 в моду j для $j_0 = 1, 2, 3$ соответственно. Видно, что падающая волна первой моды во входном канале left эффективно преобразуется во вторую (третью) моду в выходном канале down, если энергия электрона соответствует второй (третьей) энергетической подзоне. Прямой угол обладает также свойством преобразовывать вторую моду в третью (и наоборот) в третьей (второй) энергетической подзоне (см. идентичные кривые T_{32} и T_{23} на рис.3, 4).

Максимумы кривых T_{11} , T_{21} , T_{31} на рис.2 примерно совпадают с точками $q_1 = 1, 2, 3$ соответственно. Естественным объяснением этого факта является совпадение в этих точках продольного волнового вектора падающей волны с поперечным волновым вектором прошедшей, в силу чего создаются благоприятные условия для

Энергии связанных состояний в прямоугольном соединении квантовых каналов

N	$(E_{th} - E_b)/E_{th}$	$(E_{th} - E_b)/ 2L $
2	0,0186	0,0102
3	0,0344	0,0106
4	0,0439	0,0087
5	0,0500	0,0069
10	0,0622	0,0025
15	0,0658	0,0013
20	0,0674	0,00075
Континуальный предел (наш расчет)	0,0696	0
Континуальный предел ([1])	0,0784	0

перемешивания мод в области пересечения каналов. Аналогичные максимумы наблюдаются и на рис.3, *b* в точках $q_2 = 1, 2, 3$ ($q_2 = k_2 / k_{th} = \sqrt{q_1^2 - 3}$), однако для высоколежащих мод указанное простое правило нарушается (см. характеристики прохождения волны третьей моды на рис.4).

Существование максимумов в прохождении электронной волны характерно для пересечений и соединений квантовых каналов, однако в *L*-образной

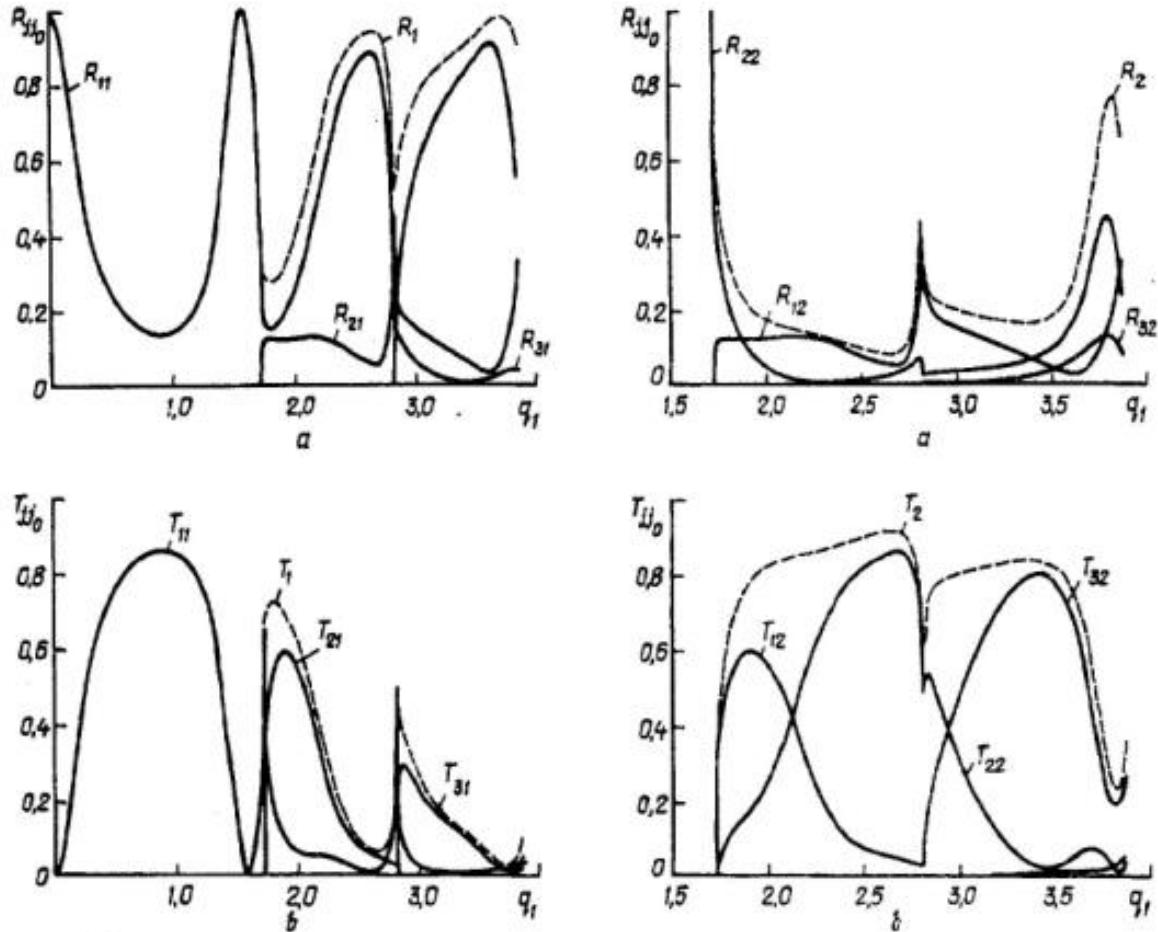


Рис.2. Вероятности рассеяния электронов в прямоугольном соединении квантовых каналов как функции $q_1 = k_1/k_{th}$; R_{j0} (a) (T_{j0} (b)) — вероятность отражения (прохождения) падающей волны

из моды j_0 в моду j ; $R_{j_0} = \sum_{j=1}^{N_0} R_{j_0}$ ($T_{j_0} = \sum_{j=1}^{N_0} T_{j_0}$) — полная вероятность отражения (прохождения) падающей волны моды j_0 . Границы первой, второй и третьей энергетических подзон размещены вблизи точек q_1 , равных 1,73; 2,83; 3,87 соответственно. $j_0 = 1$

Рис.3. То же, что и на рис.2, при $j_0 = 2$

структуре это свойство более ярко выражено, чем в *T*- и *X*-образных структурах [1,4,9,10]. С другой стороны, существование полного отражения волны фундаментальной моды (вблизи точки $q_1 = 1,6$) реализуется только в прямом угле. Как показано выше, этот квантово-интерференционный эффект связан со специфической структурой матрицы рассеяния системы.

Полезно сравнить полученные нами результаты с выводами работы [6] относительно характеристик рассеяния в скругленном угле (на рис.1 штриховой линией показан скругленный угол с нулевым внутренним радиусом и внешним радиусом, равным ширине канала). Как показано в [6], для транспорта электронов через скругленный угол характерна монотонная зависимость коэффициента прохождения фундаментальной моды от q_1 , причем существенное отличие от единицы имеет место лишь для энергий, близких к порогу пропускания канала. Таким образом, геометрия угла является весьма важной для определения его транспортных характеристик.

Инжекция электронов, принадлежащих определенной моде, в канал является трудноосуществимой задачей, поэтому реально наблюдаемыми величинами являются усредненный коэффициент прохождения $T^{av} = N_0^{-1} \sum_{j_0=1}^{N_0} T_{jj_0}$, определяющий проводимость вырожденного электронного газа в двумерных

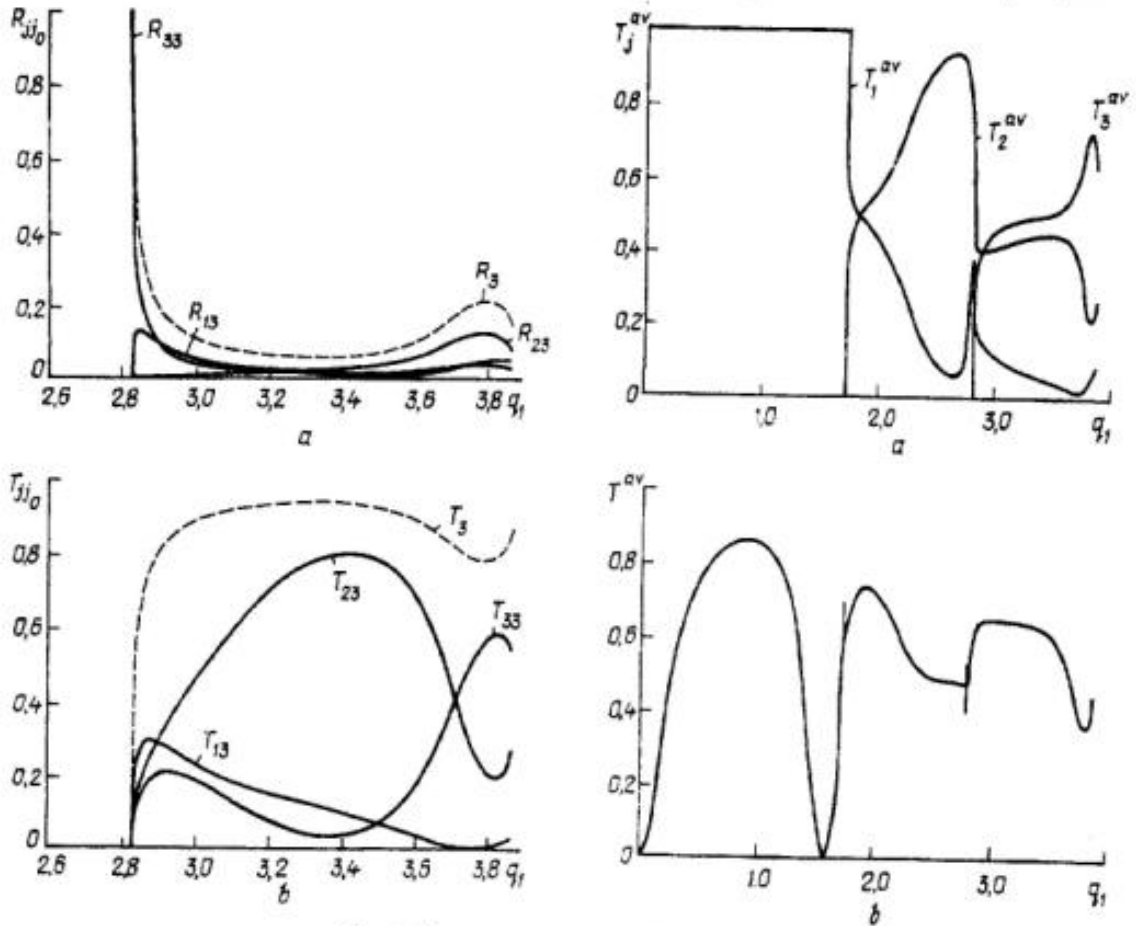


Рис.4. То же, что и на рис.3, при $j_0 = 3$
 Рис.5. Зависимость коэффициентов T_j^{av} (a) и T^{av} (b) от q_1

структурах [11,12], и коэффициент прохождения, усредненный по модам падающих электронов, $T_j^{av} = N_0^{-1} \sum_{j_0=1}^{N_0} (T_{jj_0} / T^{av})$. Последний характеризует систему как электронный фильтр [4].

Рис.5,а показывает наличие двух областей высокой проводимости прямого угла, разделенных областью слабой (вплоть до нуля вблизи $q_1 = 1,6$) проводимости. В силу этого прямоугольный канал (в отличие от скругленного) должен рассматриваться, скорее, как квантовый прибор, чем как пассивная связь различных частей нанoeлектронной цепи. Как видно из рис.5,б, прохождение волны фундаментальной моды подавляется с ростом энергии электронов, в то время как интенсивность прохождения по второй и третьей модам практически одинакова в третьей энергетической подзоне, кроме области вблизи порога прохождения четвертой моды. Следовательно, фильтрация электронов может быть достаточно эффективной в пределах второй и третьей энергетических подзон.

Таким образом, проведенные расчеты показали перспективность рассмотренной L-образной структуры для практического применения. Серьезной трудностью, однако, является существенная зависимость ее транспортных свойств от конкретной геометрии поворота под прямым углом, причем можно ожидать, что указанная зависимость будет столь же сильной и для других видов соединений и пересечений квантовых каналов.

Заключення

В роботі получена система канонічних рівнянь, описуючих балістический транспорт електронів через прямий кут, аналітически і численно дослідовані основні характеристики і свойства електронного транспорту. Показано, що достаточнo простою рекуррентною процедурою ісходніе рівняння могут быть сведены к треугольному виду, в результате чего все транспортные характеристики могут быть получены в аналитической форме. Таким образом, найдено точное решение проблемы рассеяния для дискретной модели прямоугольного соединения квантовых каналов, состоящих из N связанных дискретных цепочек, и для непрерывной модели угла в N -модовом приближении. В рамках развитого подхода получены количественные характеристики энергии основного связанного состояния системы и определены вероятности рассеяния електронів при прохождении через прямой кут. Обнаружена достаточнo нетривиальная зависимость проводимости для вырожденного електронного газа от энергии Ферми и определены условия эффективной фильтрации електронів при их прохождении через прямоугольный канал.

1. Schult R.L., Ravenhall D.G., Wyld H.W. //Phys. Rev. B.—1989.—39, N 8.—P.5476—5479.
2. Sols, Macucci M., Ravaoli U., Hess K.//J. Appl. Phys.—1989.—66, N 7.—P.3892—3906.
3. Kirzzenow G.//Phys. Rev. B.—1989.—39, N 4.—P.10452—10458.
4. Baranger H.U.//Ibid.—1990.—42, N 18.—P.11478—11491.
5. Lent C.S., Kirkner D.J.//J. Appl. Phys.—1990.—67, N 12.—P.6353—6365.
6. Lent C.S.//Appl. Phys. Lett.—1990.—56, N 25.—P.2554—2556; 57, N 17.—P.1678—1680.
7. Weisshaar A., Lary J., Goodnick S.M., Tripathi V.K.//Ibid.—1989.—55, N 21.—P.2114—2119.
8. Berggren K.-F., Zhen-li Ji //Superlatt. Microstruct.—1990.—8.—P.59—61; Phys. Rev. B.—1991.—43, N 6.—P.4760—4764.
9. Gaididei Yu. B., Malysheva L.I., Onipko A.I.//Phys. status solidi B.—1992.—172, N 2.—P.667—672.
10. Gaididei Yu.B., Malysheva L.I., Onipko A.I. //J. Phys.: Condens. Matter.—1992.—4, N 16.—P.7103—7114.
11. Landauer R.//IBM J. Res. and Develop.—1957.—1, N 1.—P.223—227.
12. Büttiker M.//Ibid.—1988.—32, N 2.—P.317—321.

Інститут кібернетики ім. В.М.Глушкова АН України
(252207 Київ, просп. Академіка Глушкова, 20),

Получено 14.10.92,

в окончательном варианте — 10.11.92

¹Інститут теоретической физики ім.Н.Н.Боголюбова АН України
(252143 Київ, ул. Метрологическая, 146)

Ю. О. Клименко, Л. І. Малышева, О. І. Онипко

КВАНТОВИЙ ТРАНСПОРТ ЕЛЕКТРОНІВ У ДВОВИМІРНОМУ ПРЯМОМУ КУТІ

Резюме

Вперше отримано точний розв'язок задачі розсіювання для двовимірної моделі прямого кута, що дозволяє ефективно визначати характеристики балістичного електронного транспорту в прямокутних з'єднаннях квантових каналів. За допомогою запропонованої рекуррентної процедури знайдено енергії зв'язаних станів, помодові і середні коефіцієнти відбивання і проходження електронів, що рухаються в прямокутному каналі в балістичному режимі. З точки зору практичних застосувань визначено фільтруючі і провідні властивості таких структур.

Yu. A. Klimenko, L. I. Malysheva, A. I. Onipko

QUANTUM ELECTRON TRANSPORT IN TWO-DIMENSIONAL RIGHT-ANGLE BEND

Summary

The exact solution of the scattering problem is obtained for the two-dimensional right-angle model. It permits finding characteristics of electron ballistic transport in right-angle shaped quantum channels. The bound-state energies, mode-to-mode and averaged transmission probabilities of electrons moving through the right-angle bend have been calculated. Conductance and electron-filtering properties of such systems are defined.