М. М. Кабардов, Б. А. Пламеневский, О. В. Сарафанов, Н. М. Шаркова

# СРАВНЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО И ЧИСЛЕННОГО ПОДХОДОВ К ИССЛЕДОВАНИЮ РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ В СИММЕТРИЧНОМ ДВУМЕРНОМ КВАНТОВОМ ВОЛНОВОДЕ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ

## §1. Введение

В работе [1], см. также книгу [2], построена асимптотическая теория резонансного туннелирования в двумерных квантовых волноводах с одним резонатором, образованным двумя сужениями малого диаметра  $\varepsilon$ . Старший член асимптотики можно использовать для вычисления характеристик резонансного туннелирования после того, как численно найдены входящие в него постоянные коэффициенты. Сравнение результатов, полученных с помощью асимптотики и путем прямого вычисления матрицы рассеяния, показало [1,2], что при энергиях электронов между первым и вторым порогами эти результаты с большой точностью совпадают в интервале  $0.1 \leq \varepsilon \leq 0.5$  (ширина волновода принята равной 1). При меньших значениях  $\varepsilon$  плохо обусловлен численный метод, а при больших значениях исчезает само резонансное туннелирование. Цель настоящей статьи – выяснить, как влияет увеличение энергии электронов на согласование численного и асимптотического подходов.

Предполагается, что волновод симметричен относительно координатных осей на плоскости, а каждое сужение при стремлении его ширины  $\varepsilon$  к нулю, совпадает с парой вертикальных углов. В таком (симметричном) волноводе приходящая волна, четная (соответственно, нечетная) относительно его оси, рассеивается только по четным

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 17-11-01126.



*Ключевые слова*: квантовый волновод, переменное сечение, уравнение Гельмгольца, резонансное туннелирование, сравнение асимптотики и вычислений.



Рис. 1. Domain  $\Omega$ 

(соответственно, по нечетным) волнам. Поэтому при увеличении диапазона энергий электронов до третьего порога дополнительные каналы рассеяния не появляются и асимптотические формулы не изменяются. Однако согласование асимптотических и численных результатов ухудшается. Для резонансной энергии (то есть энергии, при которой коэффициент прохождения имеет максимум) оба подхода попрежнему дают достаточно близкие результаты; различие составляет менее 5% на всем интервале  $0.1 \le \varepsilon \le 0.5$ . Для ширины резонансного пика результаты близки лишь при  $0.1 \le \varepsilon \le 0.15$ . С ростом  $\varepsilon$  разница между численным и асимптотическим результатами нарастает, и при  $\varepsilon = 0.3$  численное значение ширины резонансного пика почти вдвое превосходит асимптотическое. Таким образом, между вторым и третьим порогами асимптотика резонансной энергии остается надежной, а асимптотика ширины резонансного пика требует уточнения.

## §2. Постановка задачи

Опишем область  $G(\varepsilon)$  в  $\mathbb{R}^2$ , занимаемую волноводом. Для этого введем вспомогательные области G и  $\Omega$  в  $\mathbb{R}^2$ . Область G – полоса

 $G = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : x \in \mathbb{R} = (-\infty, +\infty); y \in (-l/2, l/2) \}.$ 



Рис. 2. Волновод  $G(\varepsilon)$ .

Область  $\Omega$  по предположению симметрична относительно координатных осей и содержит двойной угол K раствора  $\omega$ ,

$$K = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : |y| < |x| \tan(\omega/2) \},\$$

вместе с некоторой окрестностью его вершины; кроме того, вне достаточно большого круга (с центром в начале)  $\Omega$  совпадает с K. Граница  $\partial \Omega$  области  $\Omega$  предполагается гладкой (см. Рис. 1).

Обозначим через  $\Omega(\varepsilon)$  область, полученную из  $\Omega$  преобразованием подобия с центром в O и коэффициентом  $\varepsilon$ . Другими словами,  $(x, y) \in \Omega(\varepsilon)$  тогда и только тогда, когда  $(x/\varepsilon, y/\varepsilon) \in \Omega$ . Пусть  $K_j$  и  $\Omega_j(\varepsilon)$ обозначают K и  $\Omega(\varepsilon)$ , сдвинутые на вектор  $\mathbf{r}_j = (-1)^j (x^0, 0), j = 1, 2$ . Положим (см. Рис. 2)

$$G(\varepsilon) = G \cap \Omega_1(\varepsilon) \cap \Omega_2(\varepsilon).$$

Отметим, что область  $G(\varepsilon)$  симметрична относительно координатных осей.

Волновая функция электрона с энергие<br/>й $k^2$ удовлетворяет краевой задаче

$$\Delta u(x,y) + k^2 u(x,y) = 0, \qquad (x,y) \in G(\varepsilon), \qquad (2.1)$$
$$u(x,y) = 0, \qquad (x,y) \in \partial G(\varepsilon).$$

Кроме того, *и* подчиняется условиям излучения на бесконечности. Чтобы сформулировать эти условия, рассмотрим задачу

$$v''(y) + \lambda^2 v(y) = 0, \qquad y \in (-l/2, l/2), \tag{2.2}$$
  
$$v(-l/2) = v(l/2) = 0.$$

Собственные числа  $\lambda_q^2 = (\pi q/l)^2$  этой задачи, где q = 1, 2, ..., называются порогами. Предположим, что число  $k^2$  в (2.1) не совпадает ни с

одним из порогов. При фиксированном вещественном k существует конечное число линейно независимых ограниченных волновых функций. В качестве базиса в линейном пространстве таких функций можно взять набор волновых функций, удовлетворяющих условиям излучения

$$u_{m}(x,y) = \begin{cases} e^{i\nu_{m}x}\Psi_{m}(y) + \sum_{j=1}^{M} S_{mj}(k) e^{-i\nu_{j}x}\Psi_{j}(y) \\ +O(e^{\delta x}), & x \to -\infty, \\ \sum_{j=1}^{M} S_{m,M+j}(k) e^{i\nu_{j}x}\Psi_{j}(y) + O(e^{-\delta x}), & x \to +\infty; \end{cases}$$

$$u_{M+m}(x,y) = \begin{cases} \sum_{j=1}^{M} S_{M+m,j}(k) e^{-i\nu_{j}x}\Psi_{j}(y) + O(e^{\delta x}), & x \to -\infty, \\ e^{-i\nu_{m}x}\Psi_{m}(y) + \sum_{j=1}^{M} S_{M+m,M+j}(k) e^{i\nu_{j}x}\Psi_{j}(y) \\ +O(e^{-\delta x}), & x \to +\infty; \end{cases}$$
(2.3)

здесь M – число порогов, не превосходящих  $k^2$ , причем  $m = 1, 2, ..., M, \nu_m = (k^2 - \lambda_m^2)^{1/2}$ , а через  $\Psi_m$  обозначена собственная функция задачи (2.2), отвечающая числу  $\lambda_m^2$ ,

$$\Psi_m(y) = \begin{cases} \sqrt{1/l\nu_m} \sin \lambda_m y, & m \text{ четное,} \\ \sqrt{1/l\nu_m} \cos \lambda_m y, & m \text{ нечетное.} \end{cases}$$
(2.4)

Функция  $U_j(x,y) = e^{i\nu_j x} \Psi_j(y)$  в полосе G при  $j = 1, \ldots, M$  является волной, приходящей из  $-\infty$  и уходящей в  $+\infty$ , а  $U_{M+j}(x,y) = e^{-i\nu_j x} \Psi_j(y)$  есть волна, идущая из  $+\infty$  в  $-\infty$ . Матрица

$$S = \|S_{mj}\|_{m,j=1,...,2M}$$

с элементами из формулы (2.3) называется матрицей рассеяния; она унитарная. Величины

$$R_m = \sum_{j=1}^M |S_{mj}|^2, \qquad T_m = \sum_{j=1}^M |S_{m,M+j}|^2$$

называются коэффициентом отражения и коэффициентом прохождения, соответственно, для волны  $U_m$ , приходящей в  $G(\varepsilon)$  из  $-\infty$ ,

 $m = 1, \ldots, M$ . (Аналогичные определения можно дать и для волны  $U_{M+m}$ , приходящей из  $+\infty$ .)

Пусть  $(2\pi/l)^2 < k^2 < (3\pi/l)^2$ , то есть  $k^2$  лежит между вторым и третьим порогами. Тогда волновая функция, описывающая рассеяние волны  $U_1$ , удовлетворяет условиям излучения

$$u_1(x,y) = \begin{cases} e^{i\nu_1 x} \Psi_1(y) + S_{11}(k) e^{-i\nu_1 x} \Psi_1(y) \\ +S_{12}(k) e^{-i\nu_2 x} \Psi_2(y) + O(e^{\delta x}), & x \to -\infty, \\ S_{13}(k) e^{i\nu_1 x} \Psi_1(y) \\ +S_{14}(k) e^{i\nu_2 x} \Psi_2(y) + O(e^{-\delta x}), & x \to +\infty. \end{cases}$$

Так как область  $G(\varepsilon)$  симметрична относительно оси x и функция  $\Psi_1$  четная, то  $u_1$  – четная функция по переменной y. Следовательно, асимптотика  $u_1$  на бесконечности может содержать только слагаемые, четные относительно y. Поэтому волновая функция  $u_1$  удовлетворяет условиям

$$u_1(x,y) = \begin{cases} e^{i\nu_1 x} \Psi_1(y) + S_{11}(k) e^{-i\nu_1 x} \Psi_1(y) + O(e^{\delta x}), & x \to -\infty, \\ S_{13}(k) e^{i\nu_1 x} \Psi_1(y) + O(e^{-\delta x}), & x \to +\infty; \end{cases}$$
(2.5)

первая строка матрицы рассеяния имеет вид (S<sub>11</sub>, 0, S<sub>13</sub>, 0), а коэффициенты отражения и прохождения вычисляются по формулам

$$R_1(k,\varepsilon) = |S_{11}(k,\varepsilon)|^2, \qquad T_1(k,\varepsilon) = |S_{13}(k,\varepsilon)|^2.$$

Цель работы – найти "резонансные", значения  $k_r = k_r(\varepsilon)$  параметра k, при которых коэффициент прохождения имеет локальный максимум, и описать поведение  $T_1(k, \varepsilon)$  вблизи  $k_r(\varepsilon)$  при  $\varepsilon \to 0$ .

## §3. Асимптотические формулы

В этом пункте приведены асимптотические формулы для характеристик резонансного туннелирования. Эти формулы содержат некоторые постоянные, определяемые геометрией волновода. Сначала мы формулируем "предельные" задачи в областях, не зависящих от  $\varepsilon$ , и вводим для них некоторые специальные решения. Затем описываем асимптотику резонансного туннелирования и указываем, как постоянные из асимптотических формул связаны со специальными решениями. Эта связь используется в дальнейшем для приближенного вычисления упомянутых постоянных. **3.1. Специальные решения предельных задач.** Рассмотрим предельную область G(0,0) (Рис 3), состоящую из неограниченных частей  $G_1, G_2$  и ограниченного резонатора  $G_0$ . Краевые задачи

$$\Delta v(x,y) + k^2 v(x,y) = 0, \ (x,y) \in G_j; \ v(x,y) = 0, \ (x,y) \in \partial G_j, \quad (3.1)$$

где j = 0, 1, 2, называются предельными задачами первого рода.

Пусть  $k_e^2$  – простое собственное число оператора – $\Delta$  с условием Дирихле в резонаторе  $G_0$ , а  $v_e$  – собственная функция, отвечающая числу  $k_e^2$  и нормированная условием  $\int_{G_0} |v_e|^2 dx = 1$ . Вблизи точек  $O_1$  и  $O_2$  справедливы разложения

$$v_e(x,y) \sim \begin{cases} b_1 \widetilde{J}_{\pi/\omega}(k_e r_1) \Phi(\varphi_1), & r_1 \to 0, \\ b_2 \widetilde{J}_{\pi/\omega}(k_e r_2) \Phi(\pi - \varphi_2), & r_2 \to 0. \end{cases}$$
(3.2)

Здесь  $(r_j, \varphi_j)$  – полярные координаты с центром в  $O_j$ ,  $b_j$  – постоянные коэффициенты,  $\widetilde{J}_{\mu}$  обозначает функцию Бесселя, умноженную на некоторую постоянную так, чтобы  $\widetilde{J}_{\mu}(kr) = r^{\mu} + o(r^{\mu})$  и, наконец,  $\Phi(\varphi) = \pi^{-1/2} \cos(\pi \varphi/\omega)$ . Мы считаем, что  $b_j \neq 0$ ; это верно, например, для собственной функции, отвечающей наименьшему собственному числу резонатора. Так как резонатор симметричен относительно преобразования  $(x, y) \mapsto (-x, y)$ , то  $b_1/b_2 = \pm 1$ .

В области  $G_1$  введем решение  $V_1$  задачи (3.1), удовлетворяющее на бесконечности условию излучения

$$V_1(x) = e^{i\nu_1 x} \Psi_1(y) + S_{11}^0(k) e^{-i\nu_1 x} \Psi_1(y) + O(e^{\delta x}), \qquad x \to -\infty, \quad (3.3)$$

где  $\nu_1$ ,  $\Psi_1$  и  $\delta$  – те же, что и в (2.5). Отметим, что при  $(2\pi/l)^2 < k^2 < (3\pi/l)^2$  в асимптотике (3.3) может присутствовать слагаемое



Рис. 3. The domain G(0).

 $S_{12}^0(k)\,e^{-i\nu_2\,x}\Psi_2(y).$  Но так как область  $G_1$  симметрична относительно ос<br/>иy,то  $S_{12}^0=0.$  В окрестности точк<br/>и $O_1$ имеет место представление

$$V_1(x) = s_1(k) \widetilde{J}_{\pi/\omega}(kr_1) \Phi(\pi - \varphi_1) + O(r_1^{2\pi/\omega}), \quad r_1 \to 0,$$
(3.4)

где функции  $\widetilde{J}_{\pi/\omega}$ ,  $\Phi$  и координаты  $(r_1, \varphi_1)$  – те же, что и в формуле (3.2).

В области  $\Omega$ , введенной в п. 2, рассмотрим краевую задачу

$$\Delta w(\xi,\eta) = 0, \quad (\xi,\eta) \in \Omega; \qquad w(\xi,\eta) = 0 \quad (\xi,\eta) \in \partial\Omega, \tag{3.5}$$

которая называется предельной задачей второго рода; через  $(\xi, \eta)$  обозначаются декартовы координаты с началом в центре симметрии Oобласти  $\Omega$ . Обозначим через  $w^r$  решение задачи (3.5), удовлетворяющее при  $\rho := \text{dist} \{(\xi, \eta), O\} \to \infty$  условиям

$$w^{r}(\xi,\eta) = \begin{cases} \beta \rho^{-\pi/\omega} \Phi(\varphi) + O\left(\rho^{-3\pi/\omega}\right), & \xi > 0; \\ \left(\rho^{\pi/\omega} + \alpha \rho^{-\pi/\omega}\right) \Phi(\pi-\varphi) + O\left(\rho^{-3\pi/\omega}\right), & \xi < 0; \end{cases}$$
(3.6)

здесь функция  $\Phi$  та же, что и в формуле (3.2); коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$  зависят только от формы области  $\Omega$  и подлежат вычислению.

**3.2. Асимптотические формулы.** Пусть  $k_e^2$  – простое собственное число задачи (3.1) в резонаторе  $G_0$ . Тогда резонансное значение  $k_{\rm res}^2$  параметра  $k^2$  вычисляется по формуле

$$k_{\rm res}^2 = k_e^2 - 2\alpha b_1^2 \varepsilon^{2\pi/\omega} + O\left(\varepsilon^{2\pi/\omega+2-\tau}\right),$$

где  $\tau$  – малое положительное число. При  $k^2 - k_e^2 = O(\varepsilon^{2\pi/\omega})$  коэффициент прохождения допускает представление

$$T_1(k,\varepsilon) = \frac{1}{1 + P^2 \left(\frac{k^2 - k_{\rm res}^2}{\varepsilon^{4\pi/\omega}}\right)^2} \left(1 + O(\varepsilon^{\tau})\right),$$

где  $P = (b_1\beta|s_1(k_e)|)^{-2}$ , число  $\tau$  – то же, что и выше. Таким образом,  $T_1$  имеет пик при  $k^2 = k_r^2$ , ширина которого на полувысоте равна

$$\Upsilon(\varepsilon) = (2/P)\varepsilon^{4\pi/\omega}.$$
(3.7)

#### §4. Вычисление констант в асимптотических формулах

Главные части асимптотических формул, приведенных в пункте 3.2, содержат постоянные  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $b_1$ ,  $|s_1(k_e)|$ . Чтобы их вычислить, необходимо численно решить некоторые краевые задачи. Ниже мы формулируем требуемые задачи и описываем, как из полученных численных решений извлечь требуемые постоянные. Содержание этого пункта полностью совпадает с содержанием п. 5.6.1 [2], мы приводим его для удобства читателя.

**4.1. Вычисление**  $b_1$ . Для того, чтобы найти  $b_1$  в (3.2), решаем спектральную задачу

$$\Delta v + k^2 v = 0$$
 в  $G_0$ ,  $v = 0$  на  $\partial G_0$ ,

как обычно, методом конечных элементов. Пусть  $v_e$  – собственная функция, отвечающая собственному числу  $k_e^2$  и нормированная условием  $\int_{G_0} |v_e|^2 dx = 1$ . Тогда  $b_1$  можно приближенно определить равенством

$$b_1 = \varepsilon^{-\pi/\omega} \frac{v_e(-x^0 + \varepsilon, 0)}{\Phi(0)} = \sqrt{\pi} \varepsilon^{-\pi/\omega} v_e(-x^0 + \varepsilon, 0).$$

**4.2.** Вычисление  $s_1$ . Обозначим усеченную область  $G_1 \cap \{(x, y) : x > -x^0 - R\}$  через  $G_1^R$  и положим  $\Gamma^R := \partial G_1 \cap \{(x, y) : x = -x^0 - R\}$ . Введем краевую задачу

$$\begin{array}{lll} \Delta V(x,y) + k^2 V(x,y) &= 0, & (x,y) \in G_1^R; \\ V(x,y) &= 0, & (x,y) \in \partial G_1^R \setminus \Gamma^R; \\ \partial_n V(x,y) + i \nu_1 V(x,y) &= 2i \nu_1 e^{i \nu_1 R} \Psi_1(y), & (x,y) \in \Gamma^R. \end{array}$$

Решение Vотыскивается методом конечных элементов. Можно положить

$$s_1 = \sqrt{\pi} \varepsilon^{-\pi/\omega} V(-x^0 - \varepsilon, 0).$$

**4.3.** Вычисление  $\alpha$  и  $\beta$ . Введем краевую задачу для вычисления констант  $\alpha$  и  $\beta$  в формуле (3.6). Положим  $\Omega^R := \Omega \cap \{(r, \varphi) : r < R\}$  и  $\Gamma^R := \partial \Omega \cap \{(r, \varphi) : r = R\}$ . Рассмотрим задачу

$$\begin{aligned}
\Delta w(\xi,\eta) &= 0, & (\xi,\eta) \in \Omega^R; \\
w(\xi,\eta) &= 0, & (\xi,\eta) \in \partial \Omega^R \setminus \Gamma^R; \\
\partial_n w(\xi,\eta) + \zeta w(\xi,\eta) &= g(\xi,\eta), & (\xi,\eta) \in \Gamma^R.
\end{aligned}$$
(4.1)

Если w – решение этой задачи и  $\zeta > 0$ , то

$$||w; L_2(\Gamma^R)|| \leq \zeta^{-1} ||g; L_2(\Gamma^R)||.$$
 (4.2)

В самом деле, подставляя u = v = w в формулу Грина

 $(\triangle u, v)_{\Omega^R} = (\partial_n u, v)_{\partial \Omega^R} - (\nabla u, \nabla v)_{\Omega^R}$ 

$$= (\partial_n u, v)_{\partial\Omega^R \setminus \Gamma^R} + (\partial_n u + \zeta u, v)_{\Gamma^R} - \zeta (u, v)_{\Gamma^R} - (\nabla u, \nabla v)_{\Omega^R}$$

получаем

$$0 = (g, w)_{\Gamma^R} - \zeta ||w; L_2(\Gamma^R)||^2 - ||\nabla w; L_2(\Omega^R)||^2.$$

Это соотношение и очевидные неравенства

$$\begin{split} \zeta \| w; L_2(\Gamma^R) \|^2 &\leqslant \zeta \| w; L_2(\Gamma^R) \|^2 + \| \nabla w; L_2(\Omega^R) \|^2 \\ &= (g, w)_{\Gamma^R} \leqslant \| w; L_2(\Gamma^R) \| \| g; L_2(\Gamma^R) \| \end{split}$$

приводят к оценке (4.2).

Обозначим левую (правую) часть  $\Gamma^R$  через  $\Gamma^R_-$  ( $\Gamma^R_+$ ). Пусть W – решение задачи (4.1) при

$$\zeta=\pi/\omega R, g|_{\Gamma^R_-}=0 \quad \mathrm{M} \quad g|_{\Gamma^R_+}=(2\pi/\omega)R^{(\pi/\omega)-1}\Phi(\varphi).$$

Так как асимптотику (3.6) можно дифференцировать, то разность  $w^r - W$  удовлетворяет задаче (4.1) с функцией  $g = O(R^{-(3\pi/\omega)-1})$ . Согласно (4.2),

$$||w^{r} - W; L_{2}(\Gamma^{R})|| \leq c \frac{\omega R}{\pi} R^{-(3\pi/\omega)-1} = c' R^{-3\pi/\omega}$$

при  $R \to +\infty.$  Мы находим Wметодом конечных элементов и определяем  $\beta$  равенством

$$\beta = \frac{W(-R,0)}{\Phi(0)} R^{\pi/\omega} = \sqrt{\pi} W(-R,0) R^{\pi/\omega}.$$

Ясно, что  $||(w_r - R^{\pi/\omega} \Phi(\varphi)) - (W - R^{\pi/\omega} \Phi(\varphi)); L_2(\Gamma^R_+)|| \leq c' R^{-3\pi/\omega},$  поэтому положим

$$\alpha = \frac{W(R,0) - R^{\pi/\omega} \Phi(0)}{\Phi(0)} R^{\pi/\omega} = \sqrt{\pi} W(R,0) R^{\pi/\omega} - R^{2\pi/\omega}.$$

#### §5. Вычисление матрицы рассеяния

Опишем метод вычисления матрицы рассеяния (см. [3], [2]) в предположении, что  $k^2$  лежит между вторым и третьим порогами. Положим

$$\begin{array}{l} G(\varepsilon,R) = G(\varepsilon) \cap \{(x,y) : -R < x < R\}, \ \Gamma^R = \Gamma_1^R \bigcup \Gamma_2^R, \\ \Gamma_1^R = \partial G(\varepsilon,R) \cap \{(x,y) : x = -R\}, \ \Gamma_2^R = \partial G(\varepsilon,R) \cap \{(x,y) : x = R\} \end{array}$$

при больших R. В качестве приближения для строки  $(S_{11}, S_{12}, S_{13}, S_{14})$ матрицы рассеяния S = S(k) предлагается минимизатор некоторого квадратичного функционала. Чтобы построить этот функционал, введем краевую задачу

$$\begin{aligned} (-\Delta - k^2) \mathcal{X}^R(x, y) &= 0, & (x, y) \in G^R; \\ \mathcal{X}^R(x, y) &= 0, & (x, y) \in \partial G^R \setminus \Gamma^R; \\ (\partial_n + i\zeta) \mathcal{X}^R(x, y) &= i(-\nu_1 + \zeta) e^{-i\nu_1 R} \Psi_1(y) \\ &+ a_1 i(\nu_1 + \zeta) e^{i\nu_1 R} \Psi_1(y) & (5.1) \\ &+ a_2 i(\nu_2 + \zeta) e^{i\nu_2 R} \Psi_2(y), & (x, y) \in \Gamma_1^R; \\ (\partial_n + i\zeta) \mathcal{X}^R(x, y) &= a_3 i(\nu_1 + \zeta) e^{i\nu_1 R} \Psi_1(y) \\ &+ a_4 i(\nu_2 + \zeta) e^{i\nu_2 R} \Psi_2(y), & (x, y) \in \Gamma_2^R, \end{aligned}$$

где  $\zeta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  – произвольное фиксированное число, и  $a_1, a_2, a_3, a_4$  – комплексные числа. Приближением для строки  $(S_{11}, S_{12}, S_{13}, S_{14})$  служит минимизатор  $a^0(R) = (a_1^0(R), a_2^0(R), a_3^0(R), a_4^0(R))$  функционала

$$J^{R}(a_{1}, a_{2}, a_{3}, a_{4}) = \|\mathcal{X}^{R} - e^{-i\nu_{1}R}\Psi_{1} - a_{1}e^{i\nu_{1}R}\Psi_{1} - a_{2}e^{i\nu_{2}R}\Psi_{2}; L_{2}(\Gamma_{1}^{R})\|^{2} + \|\mathcal{X}^{R} - a_{3}e^{i\nu_{1}R}\Psi_{1} - a_{4}e^{i\nu_{2}R}\Psi_{2}; L_{2}(\Gamma_{2}^{R})\|^{2}, \quad (5.2)$$

где  $\mathcal{X}_l^R$  – решение краевой задачи (5.1). Пусть  $[k_1^2, k_2^2]$  – отрезок непрерывного спектра, лежащий между вторым и третьим порогами и не содержащий порогов. Согласно [3] (см. также [2]), существуют такие положительные постоянные  $\Lambda$  и  $R_0$ , зависящие только от выбора отрезка  $[k_1^2, k_2^2]$ , что  $|a_j^0(R, k) - S_{1j}(k)| \leq c \exp\{-\Lambda R\}$  при всех  $R \geq R_0$  и  $k^2 \in [k_1^2, k_2^2]$ .

Для того, чтобы выразить  $\mathcal{X}^R$  через  $a_1, a_2, a_3, a_4$ , рассмотрим краевые задачи

$$(-\Delta - k^{2})v_{l}^{\pm}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in G^{R};$$

$$v_{l}^{\pm}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \partial G^{R} \setminus \Gamma^{R};$$

$$(\partial_{n} + i\zeta)v_{l}^{\pm}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_{2}^{R};$$

$$(\partial_{n} + i\zeta)v_{l}^{\pm}(x, y) = i(\mp \nu_{l} + \zeta)e^{\mp i\nu_{l}R}\Psi_{l}(y), \quad (x, y) \in \Gamma_{1}^{R}; \quad l = 1, 2;$$
(5.3)

$$(-\Delta - k^{2})v_{l+2}^{\pm}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in G^{R};$$

$$v_{l+2}^{\pm}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \partial G^{R} \setminus \Gamma^{R};$$

$$(\partial_{n} + i\zeta)v_{l+2}^{\pm}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_{1}^{R};$$

$$(\partial_{n} + i\zeta)v_{l+2}^{\pm}(x, y) = i(\mp \nu_{l} + \zeta)e^{\mp i\nu_{l}R}\Psi_{l}(y), \quad (x, y) \in \Gamma_{2}^{R}; \quad l = 1, 2.$$

$$(5.4)$$

Пусть  $v_{j,R}^{\pm}$ , j = 1, 2, 3, 4 – решения задач (5.3)–(5.4), тогда  $\mathcal{X}^R = v_{1,R}^+ + \sum_{j=1}^4 a_j v_{j,R}^-$  При этом функционал (5.2) можно переписать в виде

$$J^{R}(a,k) = \langle a\mathcal{E}^{R}(k), a \rangle + 2\operatorname{Re} \langle \mathcal{F}^{R}(k), a \rangle + \mathcal{G}^{R}(k),$$

где  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  – скалярное произведение в  $\mathbb{C}^M$ ,  $\mathcal{E}^R$  – матрица размера  $4 \times 4$ ,  $\mathcal{F}^R$  – строка длины 4, а  $\mathcal{G}^R$  – число, определенные равенствами

$$\begin{split} \mathcal{E}_{lm}^{R} &= \left( (v_{l}^{-} - e^{i\nu_{l}R}\Psi_{l}), (v_{m}^{-} - e^{i\nu_{m}R}\Psi_{m}) \right)_{\Gamma_{1}^{R}} + \left( v_{l}^{-}, v_{m}^{-} \right)_{\Gamma_{2}^{R}}, \\ \mathcal{E}_{l+2,m}^{R} &= \left( v_{l+2}^{-}, (v_{m}^{-} - e^{i\nu_{m}R}\Psi_{m}) \right)_{\Gamma_{1}^{R}} + \left( (v_{l+2}^{-} - e^{i\nu_{l}R}\Psi_{l}), v_{m}^{-} \right)_{\Gamma_{2}^{R}}, \\ \mathcal{E}_{l,m+2}^{R} &= \left( (v_{l}^{-} - e^{i\nu_{l}R}\Psi_{l}), v_{m+2}^{-} \right)_{\Gamma_{1}^{R}} + \left( v_{l}^{-}, (v_{m+2}^{-} - e^{i\nu_{m}R}\Psi_{m}) \right)_{\Gamma_{2}^{R}}, \\ \mathcal{E}_{l+2,m+2}^{R} &= \left( v_{l+2}^{-}, v_{m+2}^{-} \right)_{\Gamma_{1}^{R}} + \left( (v_{l+2}^{-} - e^{i\nu_{l}R}\Psi_{l}), (v_{m+2}^{-} - e^{i\nu_{m}R}\Psi_{m}) \right)_{\Gamma_{2}^{R}}; \\ \mathcal{F}_{m}^{R} &= \left( (v_{1}^{+} - e^{-i\nu_{1}R}\Psi_{1}), (v_{m}^{-} - e^{i\nu_{m}R}\Psi_{m}) \right)_{\Gamma_{1}^{R}} + \left( v_{1}^{+}, v_{m}^{-} \right)_{\Gamma_{2}^{R}}, \\ \mathcal{F}_{m+2}^{R} &= \left( (v_{1}^{+} - e^{-i\nu_{1}R}\Psi_{1}), v_{m+2}^{-} \right)_{\Gamma_{1}^{R}} + \left( v_{1}^{+}, (v_{m+2}^{-} - e^{i\nu_{m}R}\Psi_{m}) \right)_{\Gamma_{2}^{R}}; \\ \mathcal{G}^{R} &= \left( (v_{1}^{+} - e^{-i\nu_{1}R}\Psi_{1}), (v_{1}^{+} - e^{-i\nu_{1}R}\Psi_{1}) \right)_{\Gamma_{1}^{R}} + \left( v_{1}^{+}, v_{1}^{+} \right)_{\Gamma_{2}^{R}}, \end{split}$$

где l и m принимают значения 1 или 2. Минимум функционала достигается на строке  $a^0 = a^0(R, k)$ , удовлетворяющей системе  $a^0(R, k)\mathcal{E}^R + \mathcal{F}^R = 0$ .

## §6. Сравнение асимптотики и численных результатов

Сначала опишем результаты, полученные путем непосредственного вычисления матрицы рассеяния. Ширина волновода вдали от сужений принята равной единице, расстояние между сужениями равно 2, раствор сужений  $\omega = 0.8\pi$ . Мы вычисляем коэффициент прохождения  $T_1$  при  $\varepsilon = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ . Для  $\varepsilon < 0.1$  теряется точность

и

134



Рис. 4. Коэффициент прохождения  $T_1(k^2)$  при  $\varepsilon = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ .

вычислений, а при  $\varepsilon > 0.5$  исчезает само явление резонансного туннелирования. Исчезновение резонансного туннелирования можно объяснить тем обстоятельством, что при достаточно большом значении  $\varepsilon$ сужение перестает быть эффективным потенциальным барьером для продольного движения электронов и вероятность прохождения электронов сквозь сужение становится близкой к единице. При энергиях электронов выше второго порога предельное значение  $\varepsilon$ , до которого резонансное туннелирование еще наблюдается, равно приблизительно половине ширины волновода (вдали от сужений), выше третьего порога – трети ширины волновода и т. д.

Таблица 1. Собственные значения и собственные функции задачи в резонаторе  $G_0$ .

	1	2	3	4	5
1	$k_e^2 = 12.65$	$k_e^2 = 20.99$	$k_e^2 = 34.84$	$k_e^2 = 54.09$	$k_e^2 = 78.52$
2	$k_e^2 = 42.46$	$k_e^2 = 51.40$	$k_e^2 = 66.26$	$k_e^2 = 86.99$	$k_e^2 > \lambda_3^2$

Между вторым и третьим порогами  $(\lambda_2 := (2\pi/l)^2 = 39, 48$  и  $\lambda_3 := (3\pi/l)^2 = 88, 83)$  имеются два собственных числа закрытого резонатора  $k_{e,1}^2 = 54, 09$  и  $k_{e,2}^2 = 78, 52$ , которым отвечают собственные функции, четные относительно оси волновода (см. Таблицу 1). На рисунке (Рис. 4) при  $\varepsilon = 0.1$  присутствуют два острых пика в точках, практически совпадающих с собственными числами резонатора. При увеличении  $\varepsilon$  до значения 0.3 пики смещаются влево и остаются достаточно острыми. При  $\varepsilon = 0.4$  ширина пиков значительно увеличена. При  $\varepsilon = 0.5$  эффект резонансного туннелирования почти не наблюдается.

Кроме того, между  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  присутствуют собственные числа резонатора, которым отвечают собственные функции, нечетные относительно оси волновода (Таблица 1). Однако, эти собственные числа не влияют на рассеяние волны  $U_1$  (четной относительно оси волновода). Асимптотические формулы в п. 3.2 обеспечивают резонансный пик вблизи собственного числа резонатора при условии, что в разложении (3.2) для собственной функции постоянные  $b_1$  и  $b_2$  отличны от нуля. Если же собственная функция нечетная относительно оси волновода, то обе такие постоянные аннулируются и резонансного пика нет.



Рис. 5. Асимптотические (сплошная линия) и численные (звездочки) значения резонансной энергии  $k_{\rm res}^2$ .

Далее мы главным образом обсуждаем резонансный пик вблизи собственного числа  $k_{e,1}^2 = 54,09$ . Рисунок 5 демонстрирует хорошее согласование численного и асимптототического описаний резонансной



Рис. 6. Асимптотические (сплошная линия) и численные (звездочки) значения ширины Y резонансного пика.



Рис. 7. Форма резонансного пика, найденная с помощью асимптотики (сплошная линия) и численно (точки) при  $\varepsilon = 0.1$ .

энергии для этого случая. В интервале  $0.1 \leqslant \varepsilon \leqslant 0.5$  имеем

$$|k_{\mathrm{res},a}^2(\varepsilon) - k_{\mathrm{res},n}^2(\varepsilon)|/k_{\mathrm{res},a}^2(\varepsilon) < 0.05$$

На рисунке 6 показана зависимость логарифма ширины резонансного пика от  $\ln \varepsilon$ . Предсказываемая асимптотикой линейная зависимость имеет место и для численных результатов. При  $\varepsilon = 0.1$  асимптотическое и численное значение ширины резонансного пика согласуются достаточно хорошо (см. Рис. 7). С ростом  $\varepsilon$  "численный" резонансный пик быстро расплывается по сравнению с асимптотическим (Рисунки 8–9). Для второго пика расплывание происходит еще быстрее.



Рис. 8. Форма резонансного пика, найденная с помощью асимптотики (сплошная линия) и численно (точки) при  $\varepsilon = 0.2$ .



Рис. 9. Форма резонансного пика, найденная с помощью асимптотики (сплошная линия) и численно (точки) при ε = 0.3.

## ЛИТЕРАТУРА

- Л. М. Баскин, М. М. Кабардов, П. Нейттаанмяки, Б. А. Пламеневский, О. В. Сарафанов, Асимптотика и численное исследование резонансного туннелирования в двумерных квантовых волноводах переменного сечения. — Ж. вычисл. матем. матем. физ. 53, No. 11 (2013), 1835–1855.
- L. Baskin, P. Neittaanmäki, B. Plamenevskii, O. Sarafanov, Resonant Tunneling: Quantum Waveguides of Variable Cross-Sections. — Asymptotics, Numerics, Applications. Lect. Not. Numer. Methods Engineering and Sciences, Springer, 2015.
- Б. А. Пламеневский, О. В. Сарафанов, О методе вычисления матриц рассеяния для волноводов. — Алгебра и анализ 23, No. 1 (2011), 200-231.

Kabardov M. M., Plamenevskiy B. A., Sarafanov O. V., Sharkova N. M. Comparison of asymptotic and numerical approaches to the study of the resonant tunneling in a two-dimensional symmetric quantum waveguide of variable cross-sectionto

The waveguide coincides with a strip having two narrows of width  $\varepsilon$ . An electron wave function satisfies the Dirichlet boundary value problem for the Helmholtz equation. The part of the waveguide between the narrows serves as a resonator and conditions for the electron resonant tunneling can occur. In the paper, asymptotic formulas as  $\varepsilon \to 0$  for characteristics of the resonant tunneling are used. The asymptotic results are compared with numerical ones obtained with approximate calculation of the scattering matrix for energies in the interval between the second and the third thresholds. The comparison allows to state an interval of  $\varepsilon$ , where the asymptotic and numerical approaches agree. The suggested methods can be applied to more complicated models than one considered in the paper. In particular, the same approach can be used for asymptotic and numerical analysis of the tunneling in three-dimensional quantum waveguides of variable cross-section.

Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. М.А. Бонч-Бруевича, пр. Большевиков д. 22, к. 1. 193232 Санкт-Петербург, Россия *E-mail*: kabardov@bk.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская набережная, д. 7-9 199034 Санкт-Петербург, Россия *E-mail*: b.plamenevskii@spbu.ru o.sarafanov@spbu.ru n.sharkova@spbu.ru Поступило 27 октября 2017г.