

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Квантовые логические вентили

А.А. Горбацевич, Н.М. Шубин

Рассмотрены способы построения логических вентилях на основе твердотельных и молекулярных структур, в которых преобразование информации реализуется посредством процессов, описываемых законами квантовой механики, а сами вентили в стационарном состоянии не потребляют энергии, подобно классическим комплементарным структурам металл–оксид–полупроводник (КМОП). В квантовых аналогах КМОП-схем I поколения переключение между логическими уровнями осуществляется посредством быстрых квантово-механических туннельных процессов, но транспорт носителей, определяющий передаточные характеристики прибора, носит классический диффузионно-дрейфовый характер. Квантовые аналоги КМОП-схем II поколения представляют собой открытые квантовые системы, которым присущ когерентный механизм транспорта носителей заряда. Создание технологии литографии с атомной точностью сделает возможным широкое использование квантовых молекулярных вентилях в традиционных компьютерных архитектурах.

Ключевые слова: квантовый транспорт, резонансное туннелирование, квантовая интерференция, неэрмитов гамильтониан, PT -симметрия, особая точка, слияние резонансов, логические вентили, КМОП-транзистор, квантовый инвертор, напряжение переключения, передаточная характеристика, наноэлектроника, молекулярная электроника

PACS numbers: 03.65.Nk, 03.65.Xp, **85.35.** – p, **85.65.** + hDOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.12.038310>

Содержание

1. Введение (1209).
 2. Квантовые аналоги КМОП-схем I поколения: классический транспорт и квантовый механизм переключения (1211).
2.1. Бездиссипативная передислокация волновой функции в квантовой структуре. 2.2. Передислокация волновой функции в квантовой структуре с учётом диссипации. 2.3. Реализация простейших логических схем.
 3. Квантовый транспорт и резонансы: единая теория резонансов и антирезонансов (1214).
3.1. Открытые квантовые системы и резонансы. 3.2. Особые точки в открытых квантовых системах и PT -симметрия.
 4. Квантовые аналоги КМОП-схем II поколения: молекулярные структуры с управляемыми резонансами (1217).
4.1. Общий принцип работы квантового инвертора. 4.2. Управление резонансами в квантовом инверторе. 4.3. Примеры моделей молекулярного аналога КМОП-инвертора, управляемого сдвигом резонансов и антирезонансов.
 5. Заключение (1224).
- Список литературы (1224).

А.А. Горбацевич. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский проспект 53, 119991 Москва, Российская Федерация
E-mail: aagor137@mail.ru, aag.qdn@miee.ru

Н.М. Шубин. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский проспект 53, 119991 Москва, Российская Федерация; Национальный исследовательский университет МИЭТ, пл. Шокина 1, 124498 Зеленоград, Москва, Российская Федерация
E-mail: n.s.vanderveer@gmail.com

Статья поступила 13 декабря 2017 г.

1. Введение

Основу современной электроники составляют КМОП-схемы, архитектура которых основана на паре комплементарных МОП-транзисторов (МОП — металл–оксид–полупроводник), объединённых по входу [1]. В стационарном состоянии при заданном напряжении на входе (рис. 1) один из транзисторов открыт, а другой закрыт, что естественным образом реализуется, если комплементарная пара состоит из транзисторов p - и n -типа. Электрическую схему, реализующую логическую функцию, принято называть вентилях. На рисунке 1 изображён вентиль НЕ (инвертор), который получается, если транзисторы в КМОП-паре объединить и по выходу. Нагрузкой для вентиля служит, как правило, другой логический вентиль, в котором входное напряжение подаётся на затворы транзисторов КМОП-пары, электрически изолированные от каналов транзисторов. Поэтому выходное сопротивление вентиля очень велико, и ток через вентиль в стационарном состоянии определяется током утечки по затвору МОП-транзистора, который очень мал. Соответственно, напряжение на выходе вентиля определяется опорным напряжением открытого транзистора КМОП-пары.

В инверторе опорные напряжения подобраны таким образом, чтобы при напряжении на входе $V_{in} = V_{ref2}$ был открыт транзистор, на который подано опорное напряжение V_{ref1} (и, следовательно, закрыт транзистор с опорным напряжением V_{ref2}). При этом напряжение на выходе вентиля оказывается равным V_{ref1} . Аналогичным образом при напряжении на входе $V_{in} = V_{ref1}$ напряжение на выходе равняется V_{ref2} . Поставив в соответствие значе-

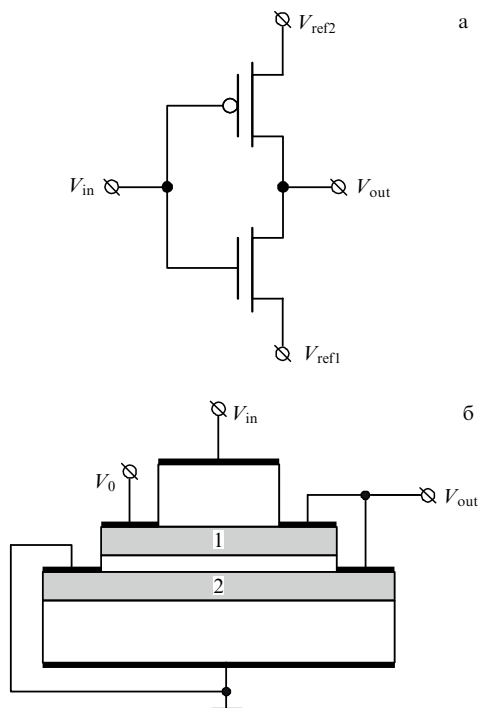


Рис. 1. (а) Электрическая схема КМОП-инвертора. (б) Устройство двухъямного квантового инвертора. Серым отмечены квантовые ямы GaAs. Опорные напряжения V_{ref1} и V_{ref2} заданы потенциалом общей шины ($V_{ref1} = 0$) и напряжением питания ($V_{ref2} = V_0$).

ниям опорного напряжения V_{ref1} и V_{ref2} логические уровни 0 и 1, получим, что прибор выполняет логическую операцию НЕ. Чаще всего в качестве опорных напряжений V_{ref1} и V_{ref2} выступают нуль (земля) и напряжение питания.

Комбинируя определённым образом входы и выходы КМОП-транзисторов, можно обеспечить реализацию любой логической функции [2]. Чрезвычайно важно, что, поскольку ток в стационарном состоянии КМОП-элемента ничтожно мал, энергопотребление КМОП-схем также очень мало, что и определяет их доминирующее положение в современной электронике, которая развивается в направлении создания всё более сложных интегральных схем со всё более высокой степенью интеграции, содержащих на сегодняшний день уже несколько миллиардов транзисторов.

Переключение транзистора в КМОП-паре из открытого состояния в закрытое (и обратно) производится путём управления концентрацией носителей заряда в канале транзистора, что в свою очередь достигается в результате относительно медленных классических процессов диффузии и дрейфа, осуществляющих перераспределение носителей заряда между каналом и стоком/истоком транзистора, а также его объёмом.

В серии работ Ю.В. Копаева с соавторами [3–6] был предложен и исследован новый класс приборов — квантовые аналоги КМОП-схем, в которых прибор переключается посредством управляемой передислокации максимума модуля амплитуды волновой функции электронов между туннельно-связанными квантовыми ямами. В данном подходе носителем информации выступает амплитуда электронной волновой функции в некоторой области квантовой системы: максимуму амплитуды от-

вечает логическая единица, а минимуму амплитуды — логический нуль. Приложение к структуре внешнего напряжения вызывает контролируемую передислокацию электронной плотности в системе, соответствующую преобразованию информации по заданному закону.

В качестве физической основы для реализации приборов с управляемой передислокацией электронной плотности было предложено использовать туннельно-связанные квантовые ямы на основе полупроводниковых гетероструктур. По сути, конструкция квантового аналога КМОП-вентилей аналогична конструкции классического КМОП-вентилей (см. рис. 1), который разрезан по плоскости, разделяющей комплементарные транзисторы, и получившиеся части соединены так, чтобы канал одного транзистора был туннельно связан с каналом другого. Таким образом, квантовые аналоги КМОП-схем [3–6] представляют собой одно из первых предложений решения проблемы увеличения плотности расположения элементов на кристалле за счёт использования вертикальной трёхмерной (3D) компоновки. Сейчас 3D-компоновка, уже широко применяемая в схемах памяти [7], считается одним из наиболее перспективных направлений развития элементной базы. Наиболее важный пример успешного использования 3D-компоновки — транзисторы FinFET (Fin Field Effect Transistor)¹ [1].

Длина канала квантового аналога КМОП-вентилей определяется возможностями литографии. В работах [3–6] предполагалось, что транспорт вдоль канала, который определяет передаточные характеристики прибора, носит классический характер, т.е. описывается классическими уравнениями переноса (диффузионно-дрейфовыми и кинетическими уравнениями), в которых квантовые эффекты учитываются через значения коэффициентов и параметров классических моделей. Таким образом, предложенные в работах [3–6] приборы, в которых переключение между логическими уровнями осуществляется в результате квантово-механической туннельной передислокации, а транспорт носит классический характер, можно классифицировать как квантовые аналоги КМОП-вентилей I поколения.

В настоящее время в связи с успехами технологии нанoeлектроники, прежде всего нанолитографии, обозначена реальная перспектива перехода к элементам полупроводниковых приборов с характерными размерами (длиной канала) порядка длины волны электрона [8]. Такие элементы следует рассматривать как полностью квантовые объекты (по сути — молекулы), отличительной особенностью которых является дискретность энергетического спектра носителей заряда в случае, когда квантовый объект изолирован от окружения. Однако реальные приборы всегда взаимодействуют с окружением, т.е. представляют собой открытые квантовые системы, а дискретные уровни энергии при этом трансформируются в резонансы конечной ширины. Транспорт носителей в квантовом приборе имеет когерентный характер, и он должен описываться в терминах квантово-механической прозрачности (коэффициента прохождения электронных волн), максимумы которой соответствуют резонансам. Описание квантово-механического

¹ Полевые транзисторы с вертикальным каналом, по форме напоминающим рыбий плавник (fin).

транспорта представляет собой сложную математическую задачу, но недавно были разработаны подходы [9–11], которые могут служить основой для построения правил проектирования полностью квантовых приборов. Такие квантовые приборы, реализующие обычные булевы функции, можно назвать квантовыми аналогами КМОП-вентилей II поколения.

Статья имеет следующую структуру. В разделе 2 рассмотрены особенности механизма управляемой передислокации в квантовых аналогах КМОП-вентилей I поколения и показано, что быстрая бездиссипативная передислокация сохраняется при учёте диссипативной релаксации. Раздел 3 содержит обзор методов моделирования когерентного транспорта в открытых квантовых системах с учётом последних результатов по свойствам взаимодействующих резонансов в открытых квантовых системах с особыми точками. В разделе 4 описаны модели квантовых аналогов КМОП-вентилей II поколения, в которых транспорт носителей носит когерентный характер. В заключении (раздел 5) обсуждаются перспективы развития квантовых аналогов традиционных логических вентилей, реализующих булевы функции, в контексте общего развития квантовых технологий.

2. Квантовые аналоги КМОП-схем I поколения: классический транспорт и квантовый механизм переключения

2.1. Бездиссипативная передислокация волновой функции в квантовой структуре

В стационарном состоянии квантовой структуры с одним заполненным уровнем в отсутствие периодического возмущения максимум электронной плотности располагается на уровне с минимальной энергией. В асимметричной структуре отвечающая этому уровню волновая функция пространственно локализована в одной из квантовых ям. При медленном адиабатическом изменении приложенного напряжения система в каждый момент остаётся в основном состоянии [12] и волновая функция совершает плавную передислокацию в пространстве. В противоположном пределе скачкообразного включения напряжения квантово-механический расчёт даёт осцилляторное поведение вероятностей нахождения электронов в ямах (квантовые биения). Передислокация при этом будет осуществляться за счёт межъямной межподзонной релаксации с испусканием фононов.

В работе [6] показано, что наряду с обычным диссипативным механизмом переключения существует бездиссипативный механизм передислокации при двухступенчатом изменении напряжения через резонансное состояние, в котором волновая функция совершает туннельные осцилляции Раби. Формально такой режим переключения отвечает безотражательному потенциалу в динамическом аналоге стационарной задачи рассеяния для уравнения Шрёдингера, который может быть явно построен для двухуровневой модели [6]. Численное моделирование показало, что бездиссипативная передислокация имеет место и при линейном изменении во времени приложенного напряжения с характерной длительностью процесса переключения порядка периода туннельных осцилляций Раби. Время выполнения логической операции в такой структуре определяется

временем туннелирования и может составлять менее 1 пс [4].

Указанный принцип позволяет реализовать квантовые аналоги КМОП-схем, не потребляющие энергии в стационарном состоянии. Энергопотребление квантового прибора в переходном режиме также может быть существенно снижено, что создаёт уникальные перспективы для построения сверхбыстродействующих систем сверхвысокой степени интеграции. Однако подход, использованный для описания динамики квантовых КМОП-схем в работах [5, 6], опирался на решение зависящего от времени уравнения Шрёдингера и не учитывал диссипативных эффектов, которые неизбежно присутствуют в реальных приборах. В разделе 2.2 мы исследуем влияние диссипативных эффектов на управляемую передислокацию максимума электронной плотности в туннельно-связанных квантовых ямах в рамках формализма матрицы плотности.

2.2. Передислокация волновой функции в квантовой структуре с учётом диссипации

Процесс передислокации волновой функции нагляднее всего пояснить простейшим примером двухъямной гетероструктуры во внешнем электрическом поле, приложенном вдоль направления роста структуры. Следуя работе [6], рассмотрим двухуровневую систему с гамильтонианом

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon - \delta(t) & \tau \\ \tau & -\varepsilon + \delta(t) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Здесь 2ε — отстройка положений уровней размерного квантования в ямах друг от друга, τ — туннельный матричный элемент, $\delta(t)$ — сдвиги энергии в ямах за счёт приложенного внешнего поля. Вид зависимости $\delta(t)$ от времени определяет процесс переключения устройства. В момент $t = 0$ напряжение к структуре ещё не приложено и $\delta(0) = 0$, при этом уровень в левой яме выше уровня в правой и волновая функция локализована преимущественно на более низком уровне (рис. 2). После завершения переключения установившееся напряжение должно соответствовать обратной картине, т.е. $\delta(t_0) = 2\varepsilon$, где t_0 — длительность переключения. В этом случае, как видно из (1), уровни энергий в ямах поменяются между собой местами и низший уровень окажется уже в левой яме, в которую преимущественно и передислоцируется волновая функция.

Релаксационные диссипативные процессы (в нашем случае — это переходы с верхнего уровня на нижний) можно корректно учесть, используя матрицу плотности системы ρ и описание её эволюции с помощью уравнения Линдблада [13], которое обеспечивает сохранение положительной определённости матрицы плотности и равен-

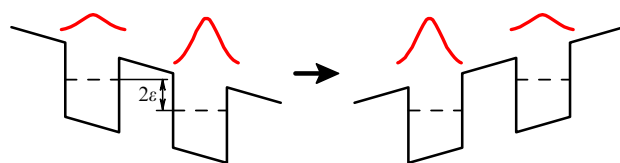


Рис. 2. (В цвете онлайн.) Передислокация волновой функции в двухъямной гетероструктуре. Красные линии схематично изображают амплитуды волновых функций в левой и правой ямах структуры.

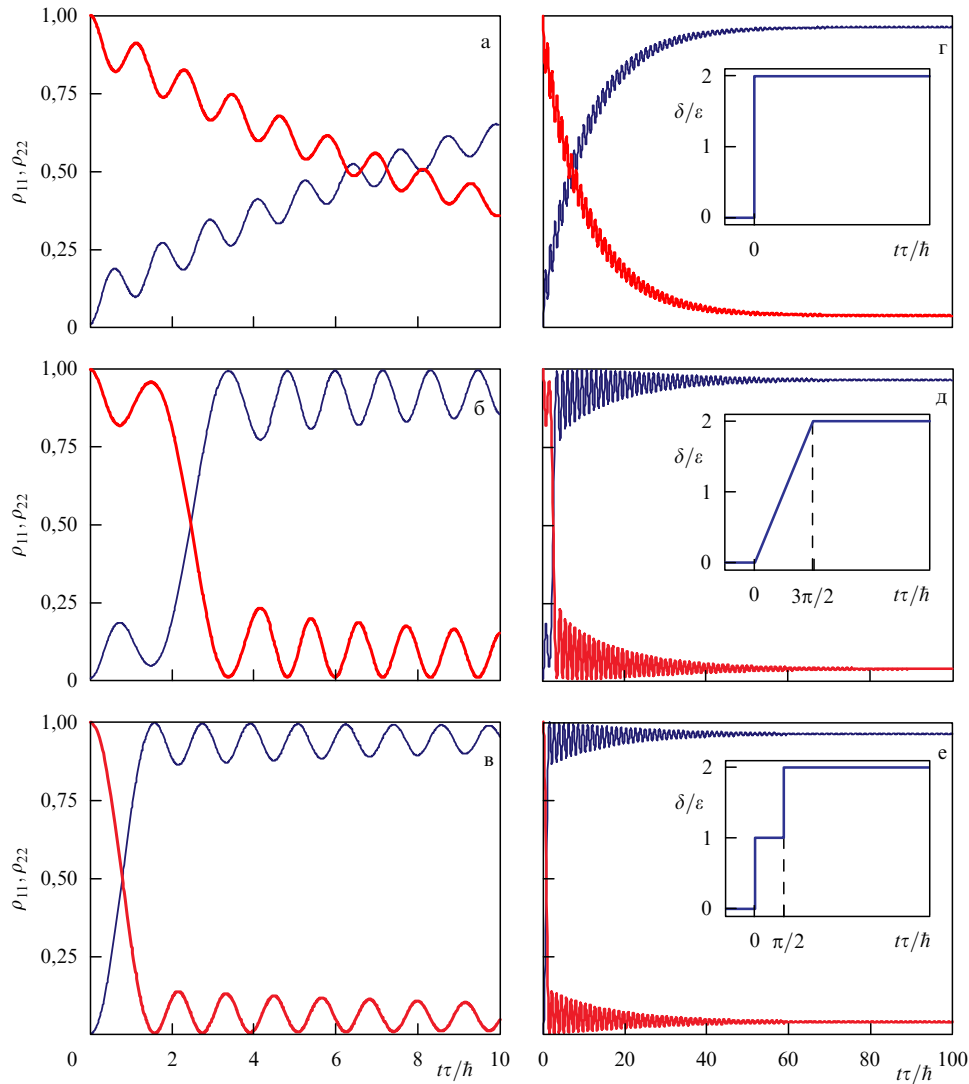


Рис. 3. (В цвете онлайн.) Численно рассчитанные эволюции заселённости левой (ρ_{11} — тонкая (синяя) кривая) и правой (ρ_{22} — жирная (красная) кривая) квантовых ям при трёх способах переключения $\delta(t)$, показанных на вставках на рис. г–е. На рисунках г–е приведены те же заселённости, что и на рис. а–в, но на большем временном масштабе. Параметры выбраны следующим образом: $\varepsilon = 2,5\tau$ и $\Gamma = 0,1\tau$.

ство единице её следа [14]:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho] + i\hbar \sum_k \Gamma_k \left(\hat{S}_k \rho \hat{S}_k^\dagger - \frac{1}{2} \hat{S}_k^\dagger \hat{S}_k \rho - \frac{1}{2} \rho \hat{S}_k^\dagger \hat{S}_k \right). \quad (2)$$

Здесь $\hat{S}_k$ — операторы Линдблада, описывающие процессы релаксации, Γ_k — величины, характеризующие скорость этих процессов. В случае рассматриваемой двухъямной системы с энергиями локализованных состояний $\varepsilon_L = \varepsilon - \delta(t)$ и $\varepsilon_R = -\varepsilon + \delta(t)$ в левой и правой ямах соответственно процессы релаксации могут происходить как с левого состояния на правое, так и наоборот, в зависимости от того, какая из энергий, ε_L или ε_R , выше. Таким образом, оператор Линдблада для релаксации из левой ямы в правую можно выбрать в виде

$$\hat{S}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

а из правой в левую — в виде

$$\hat{S}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Скорость релаксации, например, за счёт возбуждения оптических фононов с энергией ε_{ph} можно описать величиной $\Gamma_1 = \Gamma \delta(\varepsilon_L - \varepsilon_R - \varepsilon_{ph})$ для перехода из левой ямы в правую и $\Gamma_2 = \Gamma \delta(\varepsilon_R - \varepsilon_L - \varepsilon_{ph})$ для обратного перехода (здесь δ — дельта-функция Дирака).

Как упоминалось выше, быстрота процесса передислокации определяется формой управляющего сигнала, т.е. видом функции $\delta(t)$. Поскольку процессы релаксации идут медленнее, чем квантово-механические осцилляции, оптимальный режим переключения, как показано в работе [6], реализуется при кусочно-ступенчатой функции $\delta(t)$:

$$\delta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \varepsilon, & 0 \leq t < t_0, \\ 2\varepsilon, & t > t_0, \end{cases} \quad (3)$$

которая может быть связана с динамическим аналогом безотражательного потенциала [6]. На рисунке 3 приведены численно рассчитанные из уравнения (2) заселённости локализованных состояний в левой и правой ямах при различных вариантах переключения, в том числе при (3). В качестве начального условия взято распределение

электронной плотности, полностью локализованное в правой яме:

$$\rho(0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Отчётливо видно, что при резком одноступенчатом изменении потенциала переключение (рис. 3а,г) происходит только за счёт более медленных механизмов межподзонной релаксации. Из результатов расчёта временной динамики передислокации максимума амплитуды волновой функции заполненного состояния с учётом диссипации следует, что режим быстрой туннельной передислокации при двухступенчатом или линейном во времени изменении напряжения сохраняется и при учёте диссипации. Во временной динамике амплитуды волновой функции при этом имеются два масштаба: один характеризует быструю передислокацию, а другой — сглаживание колебаний амплитуды передислоцированной функции в результате диссипативных процессов.

2.3. Реализация простейших логических схем

Принцип действия квантового логического элемента основан на изменении омического сопротивления квантовых ям в зависимости от положения максимума квадрата модуля волновой функции в системе. На рисунке 1б представлена принципиальная схема двухъямного квантового инвертора. Напряжение источника питания V_0 подаётся между индивидуальными контактами к ямам 1 и 2, входной сигнал V_{in} подаётся на затвор, отделённый от верхней ямы широким туннельно-непрозрачным барьером. Выходное напряжение V_{out} снимается с общего ко всем ямам контакта. Когда максимум электронной плотности инвертора находится в первой яме, её сопротивление в продольном направлении значительно меньше, чем сопротивление второй квантовой ямы. При приложении к затвору управляющего напряжения образуются различные цепи для протекания тока питания, а на выходе инвертора напряжение изменяется от напряжения логического нуля до напряжения логической единицы.

Такой квантовый аналог КМОП-схемы, в отличие от классического прототипа, имеет функционально-интегрированную структуру, в которой управляющий электрод (вход) расположен на верхней поверхности гетероструктуры с двумя потенциальными ямами, разделёнными туннельно-прозрачным потенциальным барьером. Отличительной особенностью функционально-интегрированной структуры является необходимость формирования омических контактов к потенциальным ямам (с одной стороны — контакты шины питания, с другой — выход логического элемента). Подобное схемотехническое решение обладает не только основным достоинством классической КМОП-схемы (отсутствием токов в стационарных состояниях), но и целым рядом преимуществ по сравнению с ней. Одно из преимуществ — это возможность существенно уменьшить сквозные токи в переходных режимах при использовании многоямных квантовых элементов (три и более ям) [3–5]. Такое преимущество является принципиальным и позволяет исключить одну из основных составляющих потребляемой мощности, значимость которой возрастает при повышении частоты переключения. Сквозной ток в цепи питания в квантовом аналоге КМОП-элемента, так же как и в классической схеме, протекает лишь во время

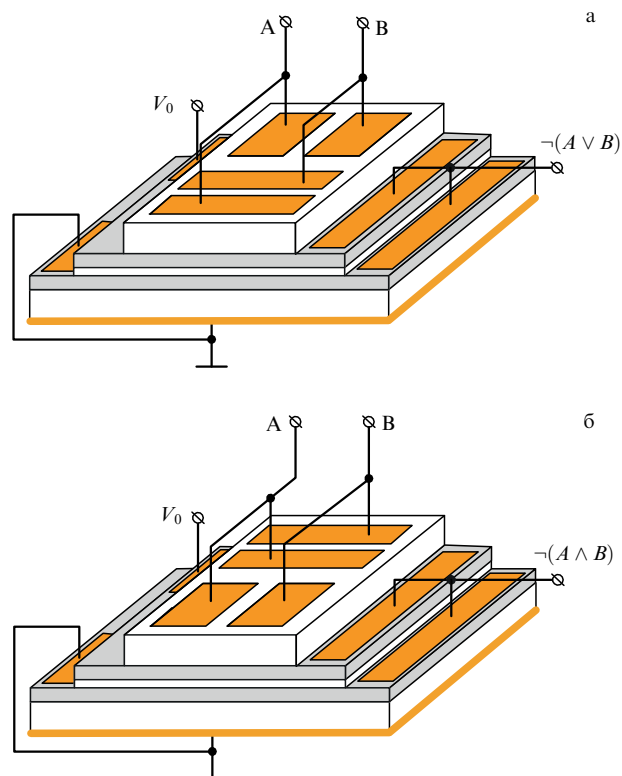


Рис. 4. (В цвете онлайн.) Схема квантовых логических элементов (а) ИЛИ – НЕ, (б) И – НЕ. Оранжевым цветом отмечены контактные площадки, а серым — квантовые ямы GaAs.

переходного процесса, т.е. при передислокации максимума волновой функции из одной ямы в другую. К существенным достоинствам предлагаемой схемы относится её высокоплотная структурная и топологическая реализация на уровне многовходовых логических вентилей типа И – НЕ и ИЛИ – НЕ без металлизированных межсхемных соединений (рис. 4).

Для изменения конфигурации волновых функций в квантовых ямах с помощью поперечного электрического поля необходимо, чтобы падение потенциала в области квантовых ям было порядка расстояния между уровнями пространственного квантования. При приложении управляющего напряжения между истоком и затвором возникает эффект экранирования электрического поля носителями в квантовой яме, расположенной ближе к затвору. Поэтому для создания поперечного электрического поля квантовые ямы (КЯ) располагаются между двумя затворами (верхним и нижним). Создание нижнего затвора с малыми токами утечки и раздельных контактов к двум затворам представляет собой сложную техническую задачу. Например, в работе [15] эта проблема решена путём создания под омическими контактами к квантовым ямам высокоомной области посредством ионной бомбардировки ионами галлия. Эта технология является сложной, дорогостоящей и недостаточно надёжной, кроме того, наличие двух управляющих электродов неудобно при практическом использовании прибора.

В работе [16] предложена структура транзистора с туннельно-связанными квантовыми ямами, которая эффективно управляется одним верхним затвором. В этом транзисторе проводящий канал представляет собой две

сильно различающиеся по толщине квантовые ямы из нелегированного GaAs, разделённые туннельно-прозрачным барьером из $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ толщиной около 100 Å. Квантовая яма, расположенная ближе к затвору, изготавливалась таким образом, чтобы подвижность в ней понижалась до $\sim 100 \text{ см}^2 (\text{В с})^{-1}$ посредством подбора соответствующих условий роста. Поскольку проводимость в такой квантовой яме практически отсутствует, она не экранирует электрическое поле затвора в области второй КЯ и структура эффективно управляется одним верхним затвором. Подвижности носителей в квантовых ямах различаются приблизительно на два порядка. При изменении напряжения на затворе происходит передислокация волновой функции электронов из одной КЯ в другую. При этом из-за сильного различия подвижностей носителей изменяется проводимость канала.

Последовательная реализация принципа локального считывания информации с квантовых ям структуры при подаче на затвор управляющего напряжения позволяет осуществить синтез функционально полного набора логических элементов нового типа [4, 5]. Прибор первого типа содержит параллельные (вдоль потенциальной ямы от контакта шины питания до выходного электрода), прибор второго типа содержит перпендикулярные входные электроды. Каждый из входных электродов при этом осуществляет передислокацию волновой функции лишь в части слоя потенциальных ям, т.е. производит канальную передислокацию волновой функции. В результате соответственно могут быть сформированы многоходовые логические элементы ИЛИ–НЕ (рис. 4а) и И–НЕ (рис. 4б). В основу предложенной конструкции положено свойство локальности эффекта передислокации максимума квадрата модуля волновой функции. Это свойство заключается в том, что эффект передислокации имеет место лишь в части квантовой структуры, расположенной под управляющим электродом прибора, сформированным на туннельно непрозрачном барьере.

Квантовые аналоги КМОП-вентилей, несмотря на ряд их достоинств, не получили распространения из-за технологических сложностей изготовления локальных контактов к квантовым ямам. В настоящее время в связи с созданием 3D-схем памяти эта технология получила дополнительный импульс к своему развитию, что, возможно, откроет перспективы и для создания квантовых аналогов КМОП-схем, рассмотренных в этом разделе.

3. Квантовый транспорт и резонансы: единая теория резонансов и антирезонансов

3.1. Открытые квантовые системы и резонансы

Описанные в разделе 2 квантовые аналоги КМОП-вентилей представляют собой структуры, в которых переключение из одного состояния в другое (между различными логическими уровнями прибора) происходит в результате когерентной квантово-механической эволюции туннельно-связанных квантовых ям. При этом формирование самих логических уровней, соответствующих определённым значениям падения напряжения на выходе прибора, осуществляется в результате классического транспорта носителей заряда вдоль КЯ. При уменьшении продольных размеров, т.е. фактически

при переходе к молекулярным структурам с дискретным энергетическим спектром, перенос зарядов через прибор происходит квантово-механическим образом. Однако при этом информация вводится в прибор и выводится из него по-прежнему посредством задания и измерения определённых значений напряжения, т.е. в классическом виде. Необходимость существования интерфейса, обеспечивающего связь с классическим окружением, — неотъемлемая черта любого квантового прибора, включая квантовые компьютеры [17, 18]. По сути, любая реальная квантовая система является открытой, так как взаимодействует и с измерительной аппаратурой, и с внешней средой.

Открытые квантовые системы (ОКС) по своим свойствам и методам их описания существенно отличаются от замкнутых квантовых систем. Главным отличием ОКС от замкнутой системы состоит в том, что ОКС не имеет стационарных состояний — все состояния в ней приобретают конечное время жизни. Формально отсутствие стационарных состояний в ОКС можно отразить введением соответствующих этим состояниям комплексных энергий, действительная часть которых отвечает непосредственно энергии частицы на заданном уровне, а мнимая — ширине этого уровня ΔE (которая, согласно принципу неопределённости Гейзенберга: $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$, связана с неопределённостью времени жизни частицы Δt в этом состоянии), зависящей от средней величины исходящего потока импульса [19].

Следует отметить, что для полной системы, состоящей как из рассматриваемой квантовой системы, так и из её окружения, все наблюдаемые величины (в том числе энергия) остаются действительными. Возникновение комплексных величин энергии и неэрмитовых операторов является результатом перехода к редуцированному описанию только квантовой системы с учётом её открытости. Наиболее наглядно это реализовано в работах Фешбаха [20–22], где введено понятие неэрмитова эффективного гамильтониана ОКС. Таким образом, описание свойств ОКС, в отличие от описания свойств замкнутых квантовых систем, производится с использованием неэрмитовых операторов, что приводит к наличию принципиально новых свойств у таких систем по сравнению со свойствами замкнутых.

Собственные состояния ОКС можно определить и как решения стационарного уравнения Шрёдингера (УШ) с граничными условиями в виде только расходящихся волн [23]. Такие состояния, называемые резонансными, могут быть классифицированы в зависимости от знаков мнимых частей энергии и волновых векторов расходящихся волн (см., например, [19, 24]). Подробное описание взаимодействия ОКС с окружением дано в работе Фано [25].

В случае, когда ширины резонансных состояний (определяемые по их времени жизни) много меньше расстояния между соседними значениями энергии этих состояний, уход частиц из них происходит экспоненциальным образом независимо друг от друга, т.е. вероятность обнаружить частицу на таком состоянии: $P \propto \exp(-\Gamma t)$, где $\Gamma = \hbar/\tau$ — ширина уровня, τ — время жизни на этом уровне. Однако, когда расстояния между энергиями резонансных уровней становятся сравнимыми с их ширинами, необходимо учитывать взаимное влияние резонансных уровней, которое может приводить к различным нетривиальным эффектам. Так, в работе [26]

показано, что при увеличении взаимодействия ОКС с окружением увеличивается ширина не всех уровней, а только части из них, количество которых совпадает с количеством каналов ухода из ОКС. В работе [27] подход Фано обобщён для случая перекрывающихся резонансных состояний. Особо стоит выделить явление "расталкивания уровней" [28, 29], которое приводит к тому, что комплексные энергии резонансных состояний не совпадают в комплексной плоскости при вариации параметров системы. В частности, при увеличении взаимодействия ОКС с окружением некоторые уровни могут совпадать по действительной части энергии, но иметь разные мнимые части. Это приводит к нетривиальному эффекту — появлению долгоживущих уровней вместе с короткоживущими при увеличении взаимодействия ОКС с окружением (см., например, [30]), что было подтверждено экспериментально, в частности, для открытого микроволнового резонатора [31].

Резонансное рассеяние играет важную роль в физике открытых квантовых систем и оптических волноводов [32–34]. Поэтому возможность создавать наноэлектронные и нанофотонные структуры с заданными резонансными свойствами имеет первостепенную важность. В последнее время наблюдается постоянный прогресс в объяснении свойств открытых квантовых систем, микроволновой электроники и оптических структур [32–35].

Традиционно описание задачи рассеяния для наноразмерных систем производится в терминах матрицы рассеяния (S -матрицы) [12]. Матрица рассеяния связывает амплитуды падающих на систему (центр рассеяния) волн с амплитудами рассеянных волн. При этом особо выделяются состояния, в которых имеются расходящиеся волны в отсутствие падающих, — такие состояния отвечают полюсам матрицы рассеяния. Это есть не что иное, как резонансные состояния в формулировке Зигерта [23]. Таким образом, полюсы матрицы рассеяния отвечают собственным значениям эффективного гамильтониана рассеивающей системы. Однако энергии, отвечающие полюсам S -матрицы, — комплексные, а реальные процессы происходят только при действительных энергиях рассеивающихся частиц. Поэтому важно правильно соотносить свойства системы при действительных энергиях с аналитическими свойствами её матрицы рассеяния.

Традиционный подход [36] к физической интерпретации комплексных энергий резонансных состояний в задаче рассеяния состоит в том, что сечение рассеяния (в одномерном случае — амплитуда прохождения) имеет симметричный максимум при энергии, равной её действительной части, с полушириной, равной её мнимой части, — резонанс Брейта – Вигнера (BW). В одномерном случае соответствующая вероятность прохождения имеет вид

$$T_{BW}(E) = \frac{4\Gamma_1\Gamma_2}{(\Gamma_1 + \Gamma_2)^2 + (E - E_0)^2}, \quad (4)$$

где E_0 — положение резонанса (действительная часть), $\Gamma_1 + \Gamma_2$ — полуширина резонанса (мнимая часть), определяемая взаимодействием с континуумом состояний слева, Γ_1 , и справа, Γ_2 , от рассеивающей системы. Однако такая трактовка адекватна только в случае хорошо разделённых узких максимумов, когда мнимые части соответствующих полюсов малы по сравнению с

расстоянием между их действительными частями. Резонансные максимумы при их сближении и утолщении могут сливаться друг с другом, несмотря на то что у полюсов матрицы рассеяния по-прежнему будут различные действительные части. То есть соответствие между полюсами и резонансными максимумами в общем случае не однозначно. В работе [37] показано, что в случае широких, но по-прежнему изолированных резонансов более адекватной оценкой положения их максимума будет абсолютное значение полюса, а не его действительная часть.

По-видимому, впервые слияние резонансов, которое не описывается на языке полюсов матрицы рассеяния, было рассмотрено в работе [38] на примере одномерной симметричной трёхбарьерной структуры. Позднее было описано также слияние трёх единичных резонансов в системе квантовых точек [29]. Результаты численного моделирования, указывающие на слияние двух резонансов, представлены в книге [39]. В работе [40] исследовано слияние (коллапс) двух единичных резонансов, сопровождающееся возникновением одного резонанса с прозрачностью, меньшей единицы, в трёхбарьерной, инвертированной двухбарьерной и некоторых других симметричных структурах, но уже как квантового фазового перехода. При этом в режиме слияния резонансов прозрачность системы имеет вид, существенно отличающийся от брейт-вигнеровского:

$$T_{\text{coalescence}}(E) = \frac{4\Gamma^{2N}}{4\Gamma^{2N} + (E - E_0)^{2N}}, \quad (5)$$

где $\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$ — туннельная связь с берегами в симметричной структуре, N — число сливающихся резонансов (в работе [40] $N = 2$). В [40] также показано, что слияние резонансов в симметричной структуре сопровождается нарушением симметрии распределения электронной плотности. Наблюдается резкое нарушение симметрии при слиянии резонансов, и параметр асимметрии ведёт себя подобно параметру порядка при квантовом фазовом переходе.

Полюсы матрицы рассеяния (собственные значения эффективного гамильтониана) также могут сливаться с образованием полюсов второго и более высоких порядков [41–43]. Однако в общем случае это не имеет прямого отношения к слиянию резонансов и, соответственно, к свойствам наблюдаемых величин. Тем не менее физические свойства системы изменяются при слиянии собственных значений S -матрицы (они перестают быть унимодулярными), что возможно, например, в системах со сбалансированным затуханием и усилением [44, 45].

В квантовой системе с различными траекториями движения носителей заряда возможна их интерференция. Одним из характерных примеров подобной интерференции в квантовых системах служит эффект Ааронова – Бома [46]. В 1961 г. Фано показал, что при рассеянии частицы на системе со связанным состоянием может наблюдаться асимметричный профиль сечения рассеяния (коэффициента прохождения в одномерном случае) [25], обусловленный возможной деструктивной интерференцией волн, прошедших через связанное состояние системы и "мимо" него. Впоследствии было установлено, что резонанс Фано представляет собой универсальное явление, которое может встречаться в различных физических системах [33].

3.2. Особые точки в открытых квантовых системах и PT -симметрия

Традиционно в квантовой механике наблюдаемым величинам ставятся в соответствие эрмитовы операторы, что обеспечивает действительность их собственных значений [12]. Особо стоит выделить среди наблюдаемых величин энергию и соответствующий ей оператор — гамильтониан. Действительность энергии и эрмитовость гамильтониана обеспечивают унитарную эволюцию волновой функции системы, т.е. сохранение нормы (числа частиц). Однако оказалось, что действительные собственные значения могут иметь и некоторые классы неэрмитовых операторов. В 1998 г. Бендер и Боттчер [47] исследовали спектр неэрмитова гамильтониана, обладающего симметрией по отношению к одновременной инверсии координат (P) и времени (T), но не симметричного относительно каждого из них по отдельности. Численными методами было показано, что в системах, обладающих PT -симметричными неэрмитовыми гамильтонианами, возможно появление полностью действительных спектров энергии. Позднее Бендер, Боттчер и Мейсинджер показали возможность обобщения традиционной квантовой механики для случая неэрмитовых PT -симметричных систем [48]. Также была решена проблема возможной неунитарной эволюции системы, описываемой неэрмитовым PT -симметричным гамильтонианом [49]. Отметим, что вскоре после открытия существования действительного спектра у PT -симметричных гамильтонианов было показано, что необходимым условием действительности спектра гамильтониана является его псевдоэрмитовость, а PT -симметричность представляет собой лишь её частный случай [50–52]. Однако PT -симметричные системы стоит выделять особо, так как они играют особую роль в оптике [53].

Ключевую особенность PT -симметричных операторов представляет собой явление спонтанного нарушения PT -симметрии, сопровождающееся нарушением действительности собственных значений оператора. Это происходит при изменении некоторого параметра системы (параметра настройки — tuning parameter), в результате чего действительные собственные значения сливаются и затем становятся комплексными. Данный процесс происходит попарно [54, 55], вследствие чего пара действительных собственных значений сливается и при дальнейшем изменении параметра системы переходит в пару комплексно сопряжённых значений. При значении параметра системы, при котором два действительных собственных значения оператора совпадают, имеет место вырождение спектра. Однако это вырождение принципиально отличается от того, которое возможно для эрмитовых операторов. В точке вырождения эрмитовы операторы всегда оказываются диагонализруемыми и имеют ортогональные собственные векторы. Например, для двухуровневой системы гамильтониан, описывающий вырожденные состояния, имеет вид

$$\hat{H}_{\text{ДР}} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Точка в пространстве параметров, в которой происходит такое вырождение системы, называется двойственной точкой (diabolic point). PT -симметричные операторы оказываются недиагонализруемыми в точке вырождения, так как происходит слияние не только собственных значений, но и собственных векторов. При этом в случае

двухуровневой системы гамильтониан принимает вид

$$\hat{H}_{\text{ЕР}} = \begin{pmatrix} E_0 & A \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $A \neq 0$. Точка в пространстве параметров, соответствующая такому механизму вырождения, называется особой точкой (exceptional point) [56]. Особые точки (ОТ) вызывают большой интерес в связи с неаналитическим характером поведения собственных значений оператора в их окрестности.

Гамильтониан любой замкнутой системы есть эрмитов оператор, поэтому необходимым условием реализации системы с неэрмитовым, в частности с PT -симметричным, гамильтонианом является открытость квантовой системы. Возможность неунитарной эволюции с несохранением числа частиц в PT -симметричной системе делает неясной возможность реализации таких систем для фермионов. Хотя для экзотических майорановских фермионов показана возможность появления связанных состояний, возникающих из-за ОТ [57, 58]. Для бозонов реализация PT -симметричных систем представляет собой более адекватную задачу, так как PT -симметричность может быть реализована как зеркально симметричное распределение областей рождения и уничтожения бозе-частиц. PT -симметричный бозе-эйнштейновский конденсат рассмотрен, например, в [59]. Ещё один пример бозонных систем — это сверхпроводники, для которых нарушение PT -симметрии экспериментально обнаружено в спектре флуктуаций [60].

Волновое уравнение, описывающее распространение электромагнитных волн, математически эквивалентно квантово-механическому уравнению Шрёдингера, поэтому PT -симметричные системы можно реализовывать и в оптических структурах [61]. В таких структурах мнимые поправки к диэлектрической проницаемости описывают хорошо определённые процессы поглощения и усиления сигнала. Именно в области всевозможных оптических структур сейчас в основном и исследуются явления, связанные с PT -симметрией и её нарушением. Многообразие рассматриваемых PT -симметричных систем велико: фотонные кристаллы [62], сверхвысокочастотные (СВЧ) резонаторы [63], PT -симметричные плазмонные метаматериалы [64, 65], лазеры [66] и т.д. Наличие ОТ в PT -симметричных системах качественно меняет многие свойства системы. Так, например, с увеличением поглощения прозрачность системы может возрасти [61] или с увеличением мощности накачки может убывать интенсивность лазерного излучения [67]. Однако следует отметить, что в оптических системах существует отсутствующее в квантово-механических системах принципиальное ограничение, из-за которого диэлектрическая проницаемость среды не может быть произвольной. Любая функция отклика, в том числе диэлектрическая проницаемость, должна удовлетворять условию причинности и, соответственно, соотношениям Крамерса – Кронига [68]. Из этого следует, что диэлектрическая проницаемость при наличии у неё ненулевых мнимых частей должна обладать дисперсией, и тогда условие PT -симметричности может быть выполнено только для дискретного набора частот [69].

Взаимосвязь идеальной прозрачности квантовой системы с асимптотической PT -симметрией эффективного гамильтониана обсуждалась в работе [70]. Однако идея о соответствии резонансного (с единичной прозрач-

ностью) состояния в эрмитовой системе некоторой вспомогательной PT -симметричной задаче рассеяния была предложена в [71, 72]. Позднее те же авторы обобщили свой результат и показали, что задача рассеяния в произвольной открытой эрмитовой системе с двумя контактами может быть переформулирована как задача рассеяния для некоторого неэрмитова гамильтониана [72].

Недавно в работах [9, 10] идея о связи резонансных состояний эрмитовой задачи рассеяния со вспомогательным PT -симметричным гамильтонианом была использована для описания слияния произвольного (чётного) числа резонансов в симметричной многобарьерной структуре с произвольным (нечётным) числом барьеров как перехода с нарушением PT -симметрии во вспомогательном гамильтониане. Похожая идея была высказана в работе [73], где слияние двух единичных резонансов описывалось как нарушение PT -симметрии в некотором вспомогательном уравнении Шрёдингера для огибающей волновой функции с граничными условиями типа Робина. В работах [9, 10] явно показано, что точное положение единичных максимумов прозрачности определяется действительными собственными значениями вспомогательного PT -симметричного гамильтониана и, соответственно, слияние резонансов представляет собой нарушение PT -симметрии вспомогательного гамильтониана и переход от действительных собственных значений к комплексным. В самой точке слияния прозрачность имеет не брейт-вигнеровский вид (5) и с увеличением числа сливающихся резонансов приближается по форме к пропусканию "полосового фильтра".

В общем случае произвольной квантовой системы, заключённой между двумя контактами, туннельная прозрачность определяется стандартным выражением [74]:

$$T = \text{Tr}(\Gamma_L G^r \Gamma_R G^a), \quad (8)$$

где Γ_L, Γ_R — мнимые части собственно-энергетических поправок, обусловленных взаимодействием с контактами, G^r, G^a — соответственно запаздывающая и опережающая функции Грина системы с учётом контактов. После вычисления функций Грина из выражения (8) получается формула для прозрачности, использующая эффективный гамильтониан Фешбаха $\hat{H}_{\text{eff}}$ [20–22]:

$$T = \frac{4 \sum_{i,j,m,k=1}^N (-1)^{i+j+m+k} M_{ij}^* M_{mk} \Gamma_{jk}^R \Gamma_{mi}^L}{|\det(\hat{E} - \hat{H}_{\text{eff}})|^2}. \quad (9)$$

Здесь M_{ij} — соответствующие миноры матрицы $\hat{E} - \hat{H}_{\text{eff}}$. В работе [11] показано, что соотношения (8) и, соответственно, (9) могут быть выражены только через характеристический определитель эффективного гамильтониана Фешбаха и ещё одного вспомогательного неэрмитова гамильтониана — $\hat{H}_{\text{aux}}$, который может быть получен непосредственно из эффективного гамильтониана:

$$T = \frac{|\hat{E} - \hat{H}_{\text{eff}}|^2 - |\hat{E} - \hat{H}_{\text{aux}}|^2}{|\hat{E} - \hat{H}_{\text{eff}}|^2}, \quad (10)$$

или в более компактной форме:

$$T = \frac{|P|^2}{|P|^2 + |Q|^2}, \quad (11)$$

где P и Q — вообще говоря, функции, зависящие от энергии, Q — характеристический детерминант вспомогательного неэрмитова гамильтониана,

$$Q = \det(\hat{E} - \hat{H}_{\text{aux}}). \quad (12)$$

В односвязной системе P — константа и формула (11) для одного узла (системы с одним уровнем энергии) переходит в формулу Брейта–Вигнера. В многосвязной системе P становится функцией энергии E . Из соотношения (11) видно, что точные положения нулей и единичных максимумов прозрачности определяются как действительные нули (корни) функций P и Q соответственно. Для пространственно симметричной системы вспомогательный гамильтониан становится PT -симметричным и может обладать особыми точками, в которых происходит слияние двух действительных корней, характеризующих единичные резонансы, и их преобразование в пару комплексно сопряжённых, определяющих один неединичный резонанс. Используя данный подход, можно, в частности, описать состоящую из двух одинаковых симметричных линейных цепочек узлов структуру, в которой наблюдается слияние нулей прозрачности с образованием широкого окна отражения. В этом случае коэффициент прохождения имеет вид

$$T(E) = \frac{(E - E_0)^{2N}}{(E - E_0)^{2N} + \Gamma^{2N}}. \quad (13)$$

Таким образом, показано, что, используя одну и ту же симметричную линейную цепочку, можно получить структуру как с широким окном прозрачности, так и с широким окном непрозрачности. По сути, в работах [9–11] построена единая теория резонансов и антирезонансов (резонансов Фано–Фешбаха), которые могут быть описаны общей формулой (11). Заметим, что случай, в котором P и Q одновременно обращаются в нуль, соответствует связанному состоянию в континууме, интенсивно исследуемому в последнее время в физике конденсированного состояния и оптике [35].

4. Квантовые аналоги КМОП-схем II поколения: молекулярные структуры с управляемыми резонансами

4.1. Общий принцип работы квантового инвертора

Рассмотрим модельную структуру квантового инвертора (рис. 5), которая аналогична структуре классиче-

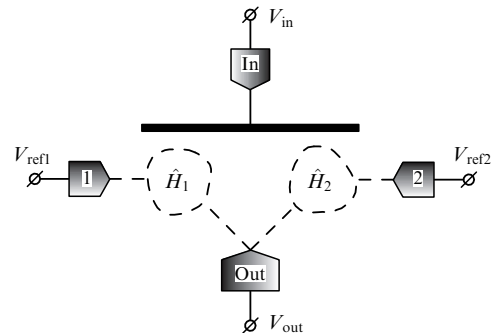


Рис. 5. Схема квантового аналога КМОП-инвертора.

ского КМОП-инвертора (рис. 1а) с заменой комплементарных МОП-транзисторов невзаимодействующими между собой квантовыми системами с гамильтонианами $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$. Эти квантовые системы (например, молекулы) играют роль управляемых электрическим полем затвора ключей ("квантовых транзисторов"). Обе системы имеют туннельную связь с выходным контактом и контактами, на которые подаются опорные напряжения V_{ref1} и V_{ref2} , задаваемые чаще всего потенциалом общей шины ("земля") и напряжением питания. Входное напряжение подаётся на контакт, имеющий только электростатическую связь с квантовыми системами и оказывающий на них действие только за счёт электрического поля (потенциала), без переноса носителей заряда. В такой структуре каждая квантовая система представляет собой квантовый проводник, транспортные свойства которого уже не описываются классической диффузионно-дрейфовой моделью, как в случае квантовых аналогов КМОП-вентилей I поколения (см. раздел 2).

Ток через квантовый проводник в условиях баллистического транспорта можно вычислить, используя следующее стандартное выражение [74]:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) (f_L(E) - f_R(E)) dE, \quad (14)$$

где $T(E)$ — коэффициент прохождения квантовой системы, определяемый соотношением (11). Разница функций заполнения Ферми–Дирака в левом, f_L , и правом, f_R , контактах задаёт эффективную область интегрирования в (14).

Для структуры инвертора, изображённой на рис. 5, используя выражение (14) и вычислив прозрачности квантовых систем, можно рассчитать токи всех выходов:

$$\begin{aligned} I_{\text{ref1}} &= \frac{e}{h} \int \left[T_{1\text{out}}(E) (f(E - eV_{\text{ref1}}) - f(E - eV_{\text{out}})) + \right. \\ &\quad \left. + T_{12}(E) (f(E - eV_{\text{ref1}}) - f(E - eV_{\text{ref2}})) \right] dE, \\ I_{\text{ref2}} &= \frac{e}{h} \int \left[T_{2\text{out}}(E) (f(E - eV_{\text{ref2}}) - f(E - eV_{\text{out}})) + \right. \\ &\quad \left. + T_{12}(E) (f(E - eV_{\text{ref2}}) - f(E - eV_{\text{ref1}})) \right] dE, \quad (15) \\ I_{\text{out}} &= \frac{e}{h} \int \left[T_{1\text{out}}(E) (f(E - eV_{\text{out}}) - f(E - eV_{\text{ref1}})) + \right. \\ &\quad \left. + T_{2\text{out}}(E) (f(E - eV_{\text{out}}) - f(E - eV_{\text{ref2}})) \right] dE. \end{aligned}$$

Выражения для токов (15), по сути, представляют собой пример многотерминального формализма Буттикера [75] для конечных значений падения напряжений. Здесь $T_{1\text{out}}$, $T_{2\text{out}}$ и T_{12} — вероятности туннелирования между соответствующими контактами. При этом, считая системы невзаимодействующими, можно положить $T_{12} = T_{1\text{out}} T_{2\text{out}}$. Опорные напряжения V_{ref1} и V_{ref2} (полагая, что $V_{\text{ref1}} < V_{\text{ref2}}$) заданы внешними идеальными источниками и в дальнейшем считаются постоянными. Входной контакт гальванически развязан с остальной системой и оказывает влияние только на коэффициент прохождения за счёт сдвига энергий квантовой системы в электрическом поле.

Принцип работы квантового инвертора (см. рис. 5) аналогичен принципу работы классического КМОП-ин-

вертора (рис. 1а), описанному во введении. При подключении к выходному контакту квантового инвертора высокоомной нагрузки (например, входа следующего инвертора или другого логического вентиля) ток через этот контакт равен нулю, $I_{\text{out}} = 0$. Предположим, что из-за приложенного входного напряжения прозрачность первой квантовой системы стала очень мала, $T_{1\text{out}} \approx 0$ (например, вследствие сдвига резонансов из эффективной области интегрирования). Тогда первое слагаемое под интегралом в выражении для выходного тока (15) обратится в нуль, а из условия $I_{\text{out}} = 0$ следует, что второе слагаемое также должно стать нулевым. При предположении ненулевой прозрачности $T_{2\text{out}}$ отсутствие выходного тока возможно только при $V_{\text{out}} \approx V_{\text{ref2}}$. При этом, как нетрудно увидеть из выражений (15), в условиях $T_{1\text{out}} \approx 0$ и $V_{\text{out}} \approx V_{\text{ref2}}$ токи I_{ref1} и I_{ref2} также обратятся в нуль. Совершенно аналогичная ситуация будет и при другом входном напряжении, обеспечивающем $T_{2\text{out}} \approx 0$. В этом случае условие $I_{\text{out}} = 0$ приведёт к $V_{\text{out}} \approx V_{\text{ref1}}$ и снова к обнулению токов I_{ref1} и I_{ref2} . Для обеспечения самосогласованности необходимо подобрать параметры системы так, чтобы прозрачности были малы: $T_{1\text{out}} \approx 0$ при $V_{\text{in}} \approx V_{\text{ref1}}$ и $T_{2\text{out}} \approx 0$ при $V_{\text{in}} \approx V_{\text{ref2}}$ соответственно. Отсутствие токов и, как следствие, энергопотребления в стационарном состоянии представляет собой основное преимущество КМОП-схем. КМОП-схема потребляет энергию только в процессе переключения. При этом величина потребляемой мощности пропорциональна квадрату питающего напряжения ($V_0 = V_{\text{ref1}} - V_{\text{ref2}}$) и обратно пропорциональна времени переключения [76].

Таким образом, необходимым условием повышения быстродействия, помимо уменьшения характерных размеров, является снижение потребляемой мощности. Однако, несмотря на значительные успехи в масштабировании элементов нанoeлектроники, напряжение питания современных кремниевых КМОП-вентилей пока не удаётся сделать существенно меньше 1 В [76], что стимулирует поиск новых приборных решений. К их числу, например, относятся туннельные транзисторы с межзонным туннелированием с напряжением питания V_0 ниже 0,5 В [77]. Соответственно, верхнюю границу диапазона питающих напряжений, представляющих практический интерес для использования в перспективных квантовых молекулярных вентилях, можно оценить как 0,1–0,2 В.

4.2. Управление резонансами в квантовом инверторе

Переключение квантовых молекулярных вентилей осуществляется управлением резонансами квантовых структур, формирующих вентиль. Рассмотрим сначала квантовый инвертор, в котором переключение между логическими уровнями физически реализуется посредством управляемого сдвига резонансов. Пусть коэффициенты прохождения $T_{1\text{out}}$ и $T_{2\text{out}}$ имеют узкие резонансные максимумы при энергиях $E = E_1$ и $E = E_2$ соответственно, на фоне некоторого постоянного значения $T_b \ll 1$, возникающего от других удалённых по энергии резонансов:

$$T_{1,2\text{out}} = T_b + A \frac{4\Gamma^2}{4\Gamma^2 + (E - E_{1,2})^2}, \quad (16)$$

где $\Gamma/(k_B T) \ll 1$ (k_B — постоянная Больцмана). В феноменологическом выражении (16) параметр Γ опре-

деляет силу взаимодействия системы с континуумом состояний в контактах и, соответственно, ширину резонанса (явления пленения заселённости [30, 31] и сужения резонансов [27, 78, 79] выходят за рамки этой модели), а параметр $0 \leq A \leq 1 - T_b \approx 1$ определяет высоту резонанса. Например, в случае несимметричной туннельной связи с левым, Γ_L , и правым, Γ_R , контактами величина Γ в (16) выражается просто как полусумма: $\Gamma = (\Gamma_L + \Gamma_R)/2$, а высота резонанса определяется коэффициентом $A = \Gamma_L \Gamma_R / \Gamma^2$. Параметр T_b — это "фоновая" прозрачность, описывающая вклад в туннельную прозрачность состояний, далеко отстоящих от рассматриваемого резонансного уровня. Расчёты из первых принципов показывают, что в реальных молекулярных структурах $T_b = 10^{-1} - 10^{-3}$ (см., например, работы [80–82]). Величина T_b определяет ток (утечки) вентиля в стационарном состоянии.

Учитывая, что вторые слагаемые в выражении (16) для T_{1out} и T_{2out} отличны от нуля только в малой (по сравнению с шириной эффективной области интегрирования) окрестности энергий E_1 и E_2 соответственно, условие определения выходного напряжения $I_{out} = 0$ можно представить в виде

$$f(E_1 - eV_{out}) - f(E_1 - eV_{ref1}) + \frac{T_b e}{2\pi \Gamma A} (V_{out} - V_{ref1}) \approx \\ \approx f(E_2 - eV_{ref2}) - f(E_2 - eV_{out}) + \frac{T_b e}{2\pi \Gamma A} (V_{ref2} - V_{out}). \quad (17)$$

Для получения симметричной передаточной характеристики необходимо подобрать опорные напряжения V_{ref1} и V_{ref2} так, чтобы при входном напряжении $V_{in}^0 = (V_{ref1} + V_{ref2})/2$ резонансы располагались симметрично относительно энергии eV_{in}^0 . С учётом влияния потенциала на входе можно сформулировать следующие условия:

$$\frac{1}{2}(E_1 + E_2) = eV_{in}^0 + e\alpha(V_{in} - V_{in}^0), \quad (18)$$

$$E_2 - E_1 = e(V_{ref2} - V_{ref1}) + 2ck_B T.$$

Здесь $0 < \alpha < 1$ определяет электростатическую связь входного управляющего потенциала, отсчитанного от V_{in}^0 , с положением энергетических уровней квантовой системы; c — расстояние между резонансами (в единицах $2k_B T$) относительно разности опорных напряжений. Величина α сильно зависит от толщины диэлектрического слоя, отделяющего управляющий электрод [83], её типичные значения порядка 0,1 и менее [84], однако теоретически для толщин слоя диэлектрика порядка 1 нм она может достигать 0,5–0,7 [83]. Экспериментально была показана возможность получить $\alpha \sim 0,2 - 0,3$ [85, 86]. На рисунке 6 приведён схематичный вид прозрачности квантовых систем и соответствующей разности функций заполнения при входном напряжении, отвечающем логическому нулю или логической единице. Условие (17) без учёта "фонового" вклада в прозрачность в этом случае иллюстративно представляется как условие того, что разности соответствующих функций заполнения, рассчитанные при энергиях резонансных пиков, должны совпадать друг с другом.

Подставляя соотношения (18) в уравнение (17), можно найти выходное напряжение как функцию от входного, $V_{out} = V_{out}(V_{in})$, и аналитически оценить глав-

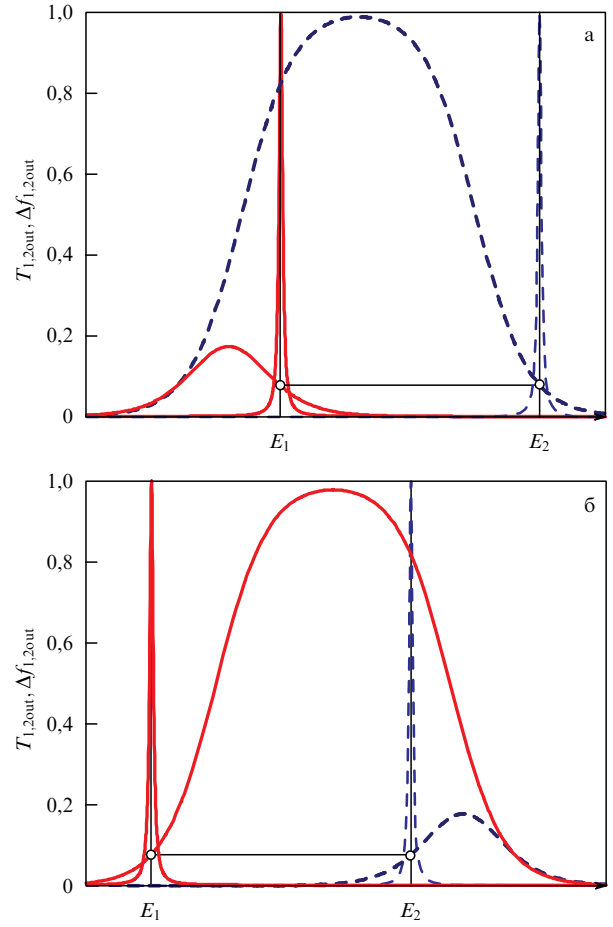


Рис. 6. (В цвете онлайн.) Иллюстрация к условию (17) для определения выходного напряжения инвертора, управляемого сдвигом резонансов при входном напряжении (а) логической единицы ($V_{in} = V_{ref2}$) и (б) логического нуля ($V_{in} = V_{ref1}$). Тонкие кривые соответствуют коэффициентам прохождения: сплошная красная — T_{1out} , штриховая синяя — T_{2out} (без учёта "фоновой" составляющей), а жирные кривые соответствуют разностям функций заполнения: $\Delta f_{1out} = f_{out} - f_1$ — сплошная красная кривая, $\Delta f_{2out} = f_2 - f_{out}$ — штриховая синяя. Без учёта "фоновой" прозрачности условие (17) сводится к равенству $\Delta f_{1out}(E_1) = \Delta f_{2out}(E_2)$.

ный параметр передаточной характеристики — максимальный (по абсолютной величине) коэффициент усиления $g = |\partial V_{out} / \partial V_{in}|$, который в силу симметрии, очевидно, достигается при $V_{in} = V_{out} = V_{in}^0$:

$$g_{max} = 2\alpha \sinh \frac{eV_0}{4k_B T} \sinh \left(\frac{eV_0}{4k_B T} + c \right) \times \\ \times \frac{1}{1 + \cosh c} \left\{ 1 + k_B T \frac{T_b}{\pi \Gamma A} \left[1 + \cosh \left(\frac{eV_0}{2k_B T} + c \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (19)$$

где $V_0 = V_{ref2} - V_{ref1} > 0$ — напряжение питания. Наличие "фоновой" прозрачности T_b приводит к тому, что величина g_{max} становится ограниченной даже при высоких напряжениях питания. В самом деле, при $eV_0 / (k_B T) \gg 1$ из (19) имеем

$$g_{max} \approx \frac{2\pi \Gamma \alpha}{T_b (1 + \cosh c) k_B T} \sim \frac{I_{on}}{I_{off}}, \quad (20)$$

где I_{on} и I_{off} — токи через "квантовые транзисторы" в открытом и закрытом состояниях соответственно. Ток в открытом состоянии пропорционален ширине и высоте резонанса, $I_{\text{on}} \sim A\Gamma$, а ток в закрытом состоянии определяется "фоновой" прозрачностью, $I_{\text{off}} \sim T_b$. Таким образом, уменьшая ток в закрытом состоянии, можно формально неограниченно увеличить коэффициент усиления инвертора (по абсолютной величине). Однако в реальных структурах "фоновая" прозрачность T_b и ширина резонанса Γ взаимосвязаны. "Фоновую" составляющую прозрачности можно качественно оценить как величину минимума между двумя далёкими брейт-вигнеровскими резонансами:

$$T_b \approx \frac{4\Gamma^2}{\Delta^2}, \quad (21)$$

где $\Delta \gg \Gamma$ — характерное расстояние между резонансами на оси энергий. Более того, пренебрежение вкладом от далёких резонансов в создаваемый ток будет оправданным при условии, что они располагаются за пределами эффективной области интегрирования в (14), т.е. должно быть выполнено также условие: $\Delta \gg \max(k_B T, V_{\text{ref}2} - V_{\text{ref}1})$. С учётом (21) выражение (20) можно представить как

$$g_{\text{max}} \approx \frac{\pi A \Delta^2 \alpha}{2\Gamma(1 + \cosh c) k_B T}. \quad (22)$$

Из (22) следует, что коэффициент усиления увеличивается при уменьшении параметра Γ , характеризующего взаимодействия с контактами. При этом уменьшаются как ширина резонанса и, соответственно, ток в состоянии "on", так и величина "фоновой" прозрачности (21) и тока в состоянии "off". Вместе с тем следует отметить, что уменьшение токов имеет не только положительный эффект, обусловленный уменьшением энергопотребления и увеличением коэффициента усиления, но и отрицательный — уменьшение токов может негативно сказываться на быстродействии прибора, поскольку сопротивление туннельного контакта $R \propto \Gamma^{-1}$, поэтому характерное время переключения инвертора $\tau = RC \propto \Gamma^{-1}$, где C — входная ёмкость инвертора, возрастает с уменьшением Γ . Возрастанию коэффициента усиления способствует также увеличение расстояния между ближайшими резонансами Δ , которое приводит к уменьшению фоновой прозрачности. Как видно из общего выражения (19), вывод о том, что возрастание отношения $I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ приводит к увеличению коэффициента усиления, остаётся справедливым и для значений напряжения питания $V_0 < k_B T$.

Другой способ управления прозрачностью квантовой системы связан с изменением высоты резонансного максимума. Данный эффект, например, имеет место в полупроводниковых резонансно-туннельных гетероструктурах, где с изменением приложенного напряжения изменяются как форма, так и высота потенциальных барьеров [87]. В работе [88] отмечено, что изменение амплитуды резонанса может быть результатом интерференционных эффектов, однако конкретный механизм такого изменения не представлен. В работах [9, 10, 40] описан механизм коллапса резонансов вблизи особой точки открытой квантовой системы, приводящего к слиянию чётного числа резонансов с единичной прозрачностью и форми-

рованию одного резонанса с прозрачностью, меньшей единицы.

Для построения феноменологической модели изменения высоты резонансного максимума рассмотрим, как и выше, узкие резонансы, возникающие на некотором не зависящем от энергии "фоне" T_b :

$$T_{1,2\text{out}} = T_b + A_{1,2} \frac{4\Gamma^2}{4\Gamma^2 + (E - E_0)^2}. \quad (23)$$

Здесь величина T_b , как и в предыдущем случае, считается малой. Согласно формуле (23) резонансные пики двух квантовых вентилей, в отличие от пиков, определяемых формулой (16), расположены при одной и той же энергии E_0 , которую в целях обеспечения симметричной характеристики посредством подбора соответствующих значений опорных напряжений можно сделать равной величине $E_0 = (e/2)(V_{\text{ref}1} + V_{\text{ref}2})$. Феноменологически описать влияние входного напряжения на высоту резонансов можно следующим образом:

$$A_1 = A_{\text{max}} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + [\alpha e(V_{\text{in}} - V_{\text{ref}2})]^2}, \quad (24)$$

$$A_2 = A_{\text{max}} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + [\alpha e(V_{\text{in}} - V_{\text{ref}1})]^2}.$$

Первый множитель в выражениях (24) соответствует максимальной (единичной) высоте резонансного пика с учётом "фоновой" составляющей прозрачности ($A_{\text{max}} = 1 - T_b \approx 1$), а второй множитель описывает влияние входного напряжения, причём $A_{1,2}(V_{\text{in}} = V_{\text{ref}2,1}) = A_{\text{max}} \approx 1$ и $A_{1,2}(V_{\text{in}} = V_{\text{ref}1,2}) = \Gamma^2/(\Gamma^2 + \alpha^2 e^2 V_0^2) \ll 1$ при $eV_0 \gg \Gamma$. Феноменологическое выражение (24) для амплитуды резонанса качественно описывает как эффект изменения прозрачности барьеров [87], так и эффект коллапса резонансов [10, 40], упомянутые выше.

Из условия $I_{\text{out}} = 0$, как и в случае уравнения (17), можно аналитически вычислить значения максимального по модулю коэффициента усиления, которое в приближении $T_b \ll 1$ примет вид

$$g_{\text{max}} \approx \frac{4k_B T}{eV_0} \tanh\left(\frac{eV_0}{4k_B T}\right) \left(2 \frac{\kappa^2}{1 + \kappa^2} - \frac{4k_B T}{\pi \Gamma} T_b \kappa^2\right), \quad (25)$$

где $\kappa = \alpha eV_0/(4\Gamma)$. Из (25) следует, что в данной модели коэффициент усиления ограничен, $g_{\text{max}} < 2$. Таким образом, максимальное значение коэффициента усиления превышает пороговое значения для функционирования инвертора ($g_{\text{th}} = 1$). Существенно, что для очень слабого взаимодействия с контактами можно добиться работы инвертора при крайне низких напряжениях питания V_0 . При этом должно быть выполнено условие $4\Gamma \ll eV_0 \ll 4k_B T$. На рисунке 7 приведён схематичный вид прозрачности квантовых систем и соответствующей разности функций заполнения при входном напряжении, отвечающем логическому нулю и логической единице. Условие $I_{\text{out}} = 0$ в этом случае иллюстративно представляется как условие пропорциональности высоты пиков и значений разности функций заполнения, рассчитанных при энергиях резонансных пиков.

В завершение этого раздела рассмотрим возможность и особенности построения квантового инвертора, основанного на управлении антирезонансами квантовых

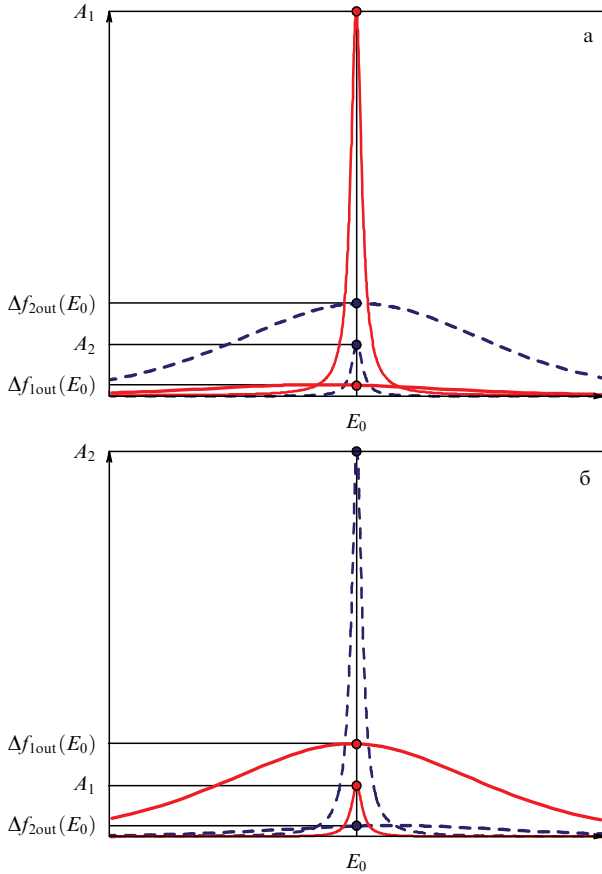


Рис. 7. (В цвете онлайн.) Иллюстрация к определению выходного напряжения инвертора, управляемого высотой резонансов при входном напряжении (а) логической единицы ($V_{in} = V_{ref2}$) и (б) логического нуля ($V_{in} = V_{ref1}$). Тонкие кривые соответствуют коэффициентам прохождения: сплошная красная — T_{1out} и штриховая синяя — T_{2out} (без учёта "фоновой" составляющей), а жирные кривые соответствуют разностям функций заполнения: $\Delta f_{1out} = f_{out} - f_1$ (сплошная красная) и $\Delta f_{2out} = f_2 - f_{out}$ (штриховая синяя). Без учёта "фоновой" прозрачности условие отсутствия выходного тока выражается равенством $\Delta f_{1out}(E_0)A_1 = \Delta f_{2out}(E_0)A_2$.

транзисторов. Антирезонанс (например, в резонансе типа Фано – Фешбаха) возникает в квантовой системе при наличии различных интерферирующих путей для носителей частиц. Как и в случае резонансов, воздействие на антирезонанс может приводить к его сдвигу по оси энергий или к его разрушению из-за подавления деструктивной интерференции. Поскольку антирезонанс определяется топологией системы, разрушить его (без изменения топологии и числа связанных траекторий) можно, только включив дополнительные неэрмитовы каналы взаимодействия с окружающей квантовую систему средой, что приводит к дефазировке волновых функций носителей заряда. Один из таких методов управления антирезонансом описан в работе [89] применительно к молекуле бензола при метаподключении. Деструктивная интерференция (антирезонанс) при этом подавляется в результате воздействия на молекулу третьего электрода, обеспечивающего взаимодействие молекулы с классическим окружением, что приводит к появлению мнимых компонент собственно-энергетической части. Аналогичный механизм управления интерференционной прозрачностью рассмотрен в работе [90] применительно к Y-разветвителю на основе молекул

транспозиацетилена. Заметим, однако, что вследствие наличия электрического взаимодействия молекулы с управляющим электродом подобный механизм управления аналогичен, скорее, не МОП-транзистору с нулевым током затвора (в идеальном случае), а транзистору с затвором Шоттки с ненулевым током затвора (даже в идеальном случае), который не подходит для создания высокоинтегрированных микросхем с низким энергопотреблением.

Управление током через квантовую систему с помощью сдвига антирезонанса гораздо менее эффективно, чем посредством сдвига резонанса. В самом деле, в случае сдвига одного антирезонанса прозрачность в его окрестности можно феноменологически оценить как

$$T(E) \approx \frac{4\Gamma^2(E - E_0)^2}{4\Gamma^2(E - E_0)^2 + \Delta^4}, \quad (26)$$

где Δ — характерное расстояние по оси энергий до ближайшего резонансного максимума. Для существенного изменения тока необходимо приложить напряжение порядка ширины минимума выражения (26), которое легко оценить как $\Delta V \sim \Delta^2/(2\Gamma e\alpha)$. При этом изменение тока окажется пропорциональным малой высоте "фоновой" прозрачности, которая достигается при энергиях, далёких от энергии антирезонансного минимума:

$$T_b = T(E - E_0 \sim \Delta) \approx \frac{4\Gamma^2}{4\Gamma^2 + \Delta^2} \approx \frac{4\Gamma^2}{\Delta^2} \ll 1.$$

Вместе с тем взаимодействие близко расположенных резонансов и антирезонансов может приводить к улучшению характеристик, что продемонстрировано в разделе 4.3.

4.3. Примеры моделей молекулярного аналога КМОП-инвертора, управляемого сдвигом резонансов и антирезонансов

В качестве примера простейшей реализации КМОП-инвертора на "квантовых транзисторах" рассмотрим структуру, схематично изображённую на рис. 8а. Роль квантовых ключей играют простейшие одноузловые резонансно-туннельные системы, каждая из которых имеет по одному резонансу (резонансно-туннельные транзисторы):

$$T_{1,2out}(E) = \frac{4\Gamma^2}{4\Gamma^2 + (E - \varepsilon_{1,2})^2}. \quad (27)$$

Для расчёта передаточной характеристики инвертора предположим, что опорное напряжение $V_{ref1} = 0$, а V_{ref2} определяется напряжением питания, $V_{ref2} = V_0$. Электростатическое влияние входного напряжения можно описать следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_1^0 + \alpha e \left(V_{in} - \frac{V_0}{2} \right), \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_2^0 + \alpha e \left(V_{in} - \frac{V_0}{2} \right), \end{aligned} \quad (28)$$

где $\varepsilon_{1,2}^0$ — энергии, соответствующие $V_{in} = V_0/2$. В качестве примера рассмотрим систему с $\varepsilon_1^0 = -0,025$ эВ, $\varepsilon_2^0 = 0,125$ эВ, $\Gamma = 0,01$ эВ, $\alpha = 0,5$ и напряжением питания $V_0 = 0,1$ В. Передаточная характеристика для этого

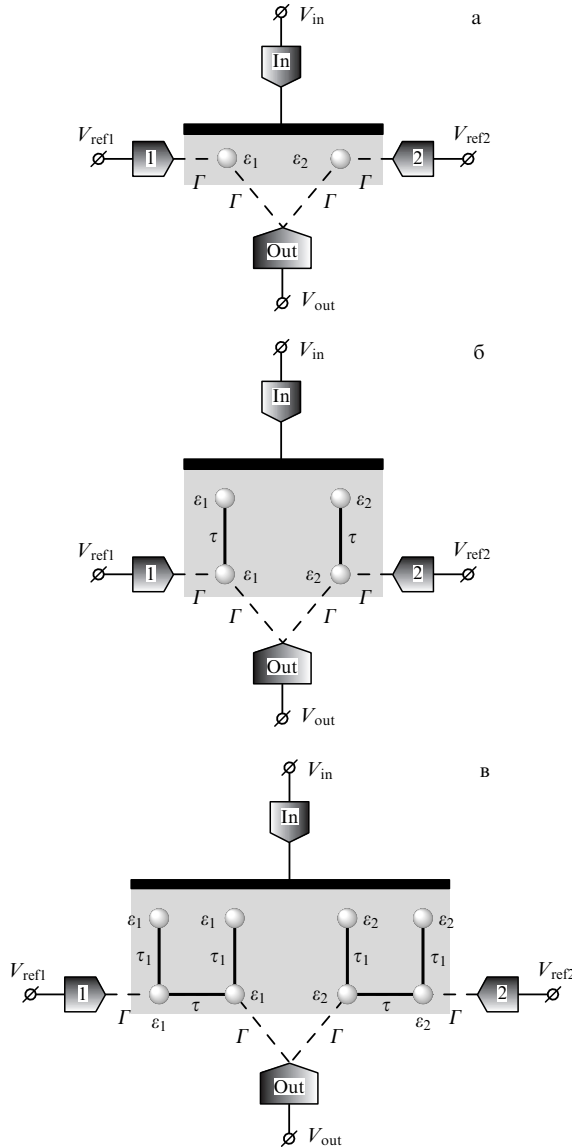


Рис. 8. Модельные структуры квантового инвертора на основе: (а) резонансно-туннельных транзисторов, (б) управляемых резонансов Фано – Фешбаха, (в) управляемых резонансов Фано – Фешбаха с широкими минимумами. Затемнённая область обозначает электростатическое воздействие входного электрода (общего затвора инвертора).

случая представлена на рис. 9а. При большем значении питающего напряжения передаточная характеристика улучшится; например, для $V_0 = 0,2$ В, $\varepsilon_1^0 = -0,05$ эВ, $\varepsilon_2^0 = 0,25$ эВ и тех же Γ и α она показана на рис. 9б.

Более сложным примером является структура, изображённая на рис. 8б. В ней роль "квантовых транзисторов" играют двухузловые системы, подключённые к контактам только одним узлом. Транспортные свойства таких систем характеризуются наличием антирезонанса типа Фано – Фешбаха при энергии, равной энергии бокового узла [91]. В самом деле, следуя общей методике, изложенной в разделе 3, и моделируя молекулярные квантовые системы 1 и 2 в инверторе (см. рис. 5) в виде таких структур с гамильтонианами

$$\hat{H}_{1,2} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1,2} & \tau \\ \tau & \varepsilon_{1,2} \end{pmatrix}, \quad (29)$$

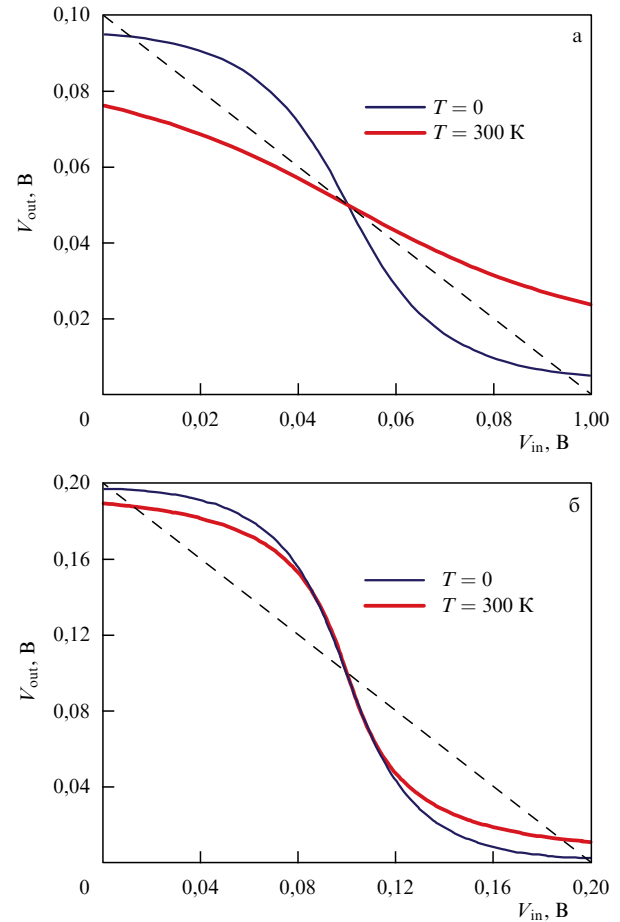


Рис. 9. Численно рассчитанные передаточные характеристики квантового инвертора на простейших одноузельных квантовых ключах (рис. 8а) при напряжении питания 0,1 В (а) и 0,2 В (б). Штриховая линия соответствует критическому коэффициенту передачи -1 . Параметры структуры, используемые для расчёта, приведены в тексте.

можно рассчитать прозрачности T_{1out} и T_{2out} в приближении широкой зоны (пренебрегая действительными частями собственно-энергетических поправок, обусловленных взаимодействием с контактами [92]) в общем виде (см. выражение (11)):

$$T_{1,2out}(E) = \frac{P_{1,2out}^2(E)}{P_{1,2out}^2(E) + Q_{1,2out}^2(E)}, \quad (30)$$

где

$$P_{1,2out}(E) = 2\Gamma(E - \varepsilon_{1,2}), \quad (31)$$

$$Q_{1,2out}(E) = (E - \varepsilon_{1,2})^2 - \tau^2.$$

Величина $Q_{1,2out}$ в (31) получена в соответствии с (12) как характеристический определитель вспомогательного гамильтониана (вход и выход подсоединены к одному узлу)

$$\hat{H}_{aux1,2} = \hat{H}_{1,2} + i\Gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - i\Gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{H}_{1,2}, \quad (32)$$

где гамильтониан $\hat{H}_{1,2}$ определён в (29). Величина $P_{1,2out}$ в такой системе, в которой контакты взаимодействуют только с одним узлом системы, выражается через минор матрицы гамильтониана (29), полученный удале-

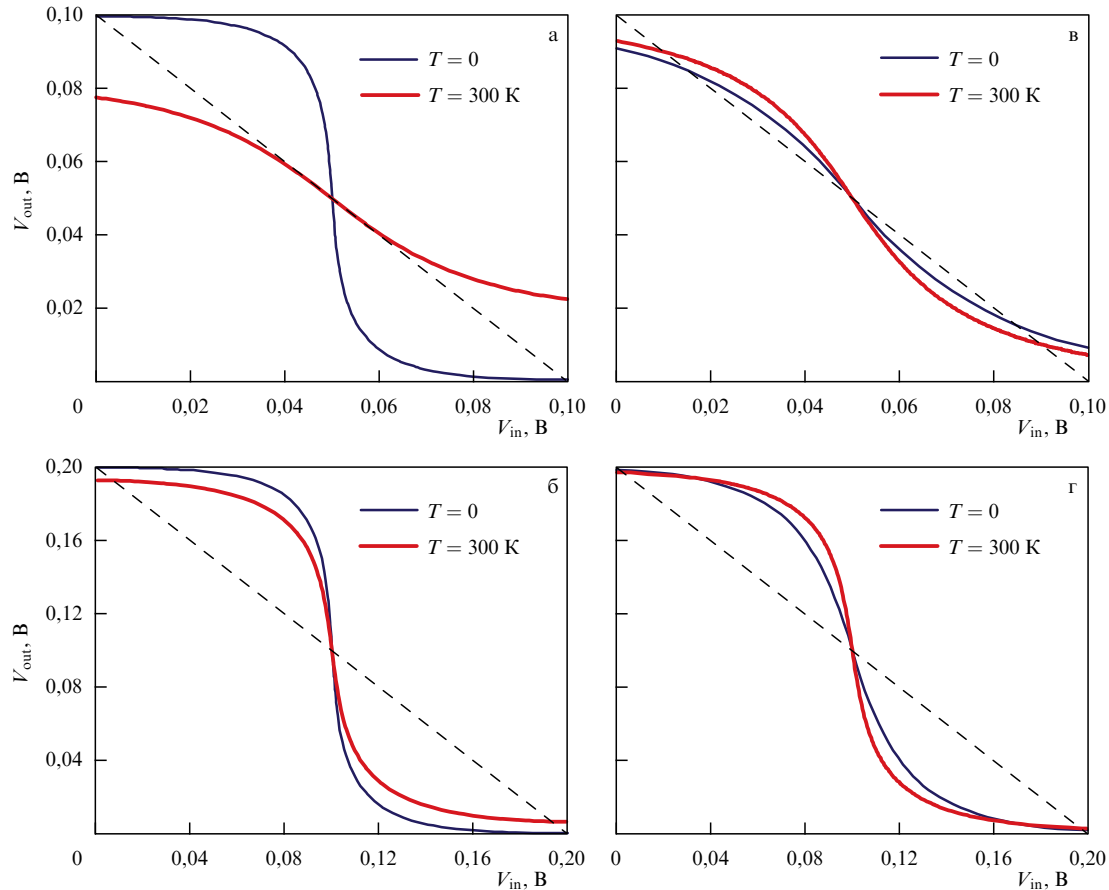


Рис. 10. Численно рассчитанные передаточные характеристики квантового интерференционного инвертора на двухузельных квантовых системах при напряжении питания 0,1 В (а, в) и 0,2 В (б, г). Штриховая линия соответствует критическому коэффициенту передачи -1 . Параметры структуры, используемые для расчёта, приведены в тексте.

нием первой строки и первого столбца [11]. Из выражения (30) видно, что прозрачности $T_{1,2out}$ равняются единице при $E = \varepsilon_{1,2} \pm \tau$ (нуль функции $Q_{1,2out}$) и нулю при $E = \varepsilon_{1,2}$ (нуль функции $P_{1,2out}$). Наличие резонансного максимума рядом с антирезонансом в рассматриваемых квантовых ключах улучшает свойства прибора благодаря эффективному подавлению "фоновой" составляющей прозрачности антирезонансом.

Влияние потенциала на входном контакте в рассматриваемой системе может быть учтено подобно тому, как это сделано в (28). Нетрудно подобрать пример параметров системы, при которых реализуется оптимальная (для нулевой температуры) передаточная характеристика. Рассмотрим систему с $\Gamma = 0,01$ эВ, $\alpha = 0,5$, напряжением питания $V_0 = 0,1$ В, $\varepsilon_1^0 = (eV_0/2)(1 + \alpha) = 0,075$ эВ, $\varepsilon_2^0 = (eV_0/2)(1 - \alpha) = 0,025$ эВ и $\tau = eV_0 = 0,1$ эВ. Такой выбор параметров обеспечивает максимум прозрачности T_{1out} в точке $E = eV_{ref1} = 0$ при входном напряжении $V_{in} = V_{ref2} = V_0$ и максимум T_{2out} в точке $E = eV_{ref2} = eV_0$ при $V_{in} = V_{ref1} = 0$. Одновременно с этим "фоновые" значения прозрачностей эффективно уменьшаются благодаря наличию антирезонансов у T_{1out} и T_{2out} в диапазоне энергий $[0, eV_0]$. Передаточная характеристика для этого случая представлена на рис. 10а, а на рис. 10б приведена аналогичная характеристика, но для системы с питающим напряжением $V_0 = 0,2$ В. Однако можно подобрать параметры системы, при которых характеристики при комнатной

температуре окажутся лучше характеристик при нулевой температуре. Например, для системы с параметрами $\varepsilon_1^0 = 0,15$ эВ, $\varepsilon_2^0 = -0,05$ эВ, $\tau = 0,25$ эВ, $\Gamma = 0,01$ эВ, $\alpha = 0,5$ и напряжением питания $V_0 = 0,1$ В передаточная характеристика представлена на рис. 10в. При большем питающем напряжении, $V_0 = 0,2$ В, передаточная характеристика приведена на рис. 10г при $\varepsilon_1^0 = 0,275$ эВ, $\varepsilon_2^0 = -0,075$ эВ, $\tau = 0,35$ эВ и тех же значениях Γ и α .

Совершенно аналогично можно провести модельный расчёт передаточной характеристики инвертора с более сложными квантовыми системами (рис. 8в), которые обладают более широкими резонансами и антирезонансами благодаря их слиянию, подробно описанному в работе [11]. В этом случае квантовые системы, играющие роль электрических ключей, описываются гамильтонианами

$$\hat{H}_{1,2} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1,2} & \tau_1 & \tau & 0 \\ \tau_1 & \varepsilon_{1,2} & 0 & 0 \\ \tau & 0 & \varepsilon_{1,2} & \tau_1 \\ 0 & 0 & \tau_1 & \varepsilon_{1,2} \end{pmatrix}, \quad (33)$$

из которых нетрудно получить соответствующие коэффициенты прохождения в виде (30), но с другими $P_{1,2out}$ и $Q_{1,2out}$:

$$P_{1,2out}(E) = 2\Gamma\tau(E - \varepsilon_{1,2})^2, \quad (34)$$

$$Q_{1,2out}(E) = (E - \varepsilon_{1,2})^4 + (E - \varepsilon_{1,2})^2(\Gamma^2 - \tau^2 - 2\tau_1^2) + \tau^4.$$

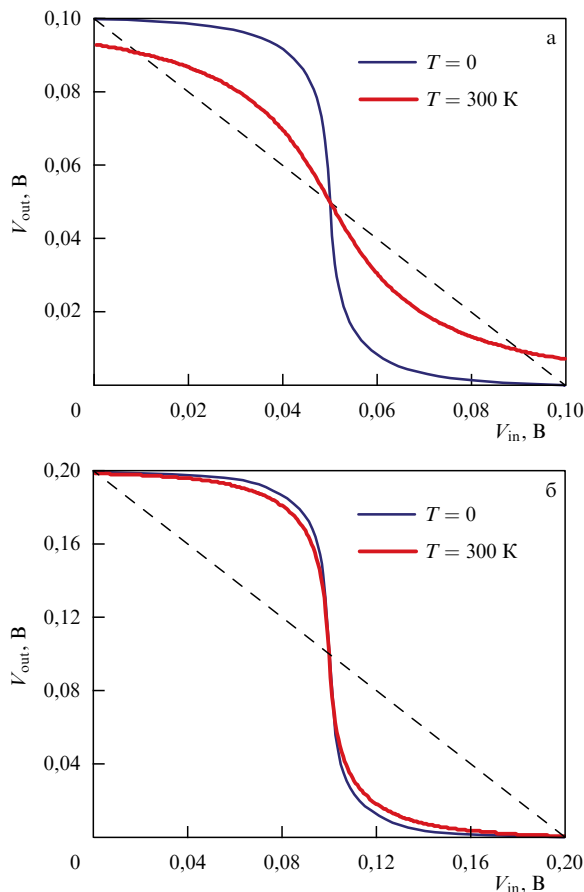


Рис. 11. Численно рассчитанные передаточные характеристики квантового интерференционного инвертора на четырёхузельных квантовых системах при напряжении питания 0,1 В (а) и 0,2 В (б). Штриховая линия соответствует критическому коэффициенту передачи -1 . Параметры структуры, используемые для расчёта, приведены в тексте.

Вспомогательный гамильтониан для вычисления $\mathcal{Q}_{1,2out}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{aux1,2} &= \hat{H}_{1,2} + i\Gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - i\Gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \varepsilon_{1,2} + i\Gamma & \tau_1 & \tau & 0 \\ \tau_1 & \varepsilon_{1,2} & 0 & 0 \\ \tau & 0 & \varepsilon_{1,2} - i\Gamma & \tau_1 \\ 0 & 0 & \tau_1 & \varepsilon_{1,2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (35)$$

где $\hat{H}_{1,2}$ определены в (33). Величина $P_{1,2out}$ опять вычисляется через минор гамильтониана (33), так как каждый контакт взаимодействует только с одним узлом в системе [11]. Такая структура (рис. 8в) имеет более широкие антирезонансы по сравнению с антирезонансами структуры, показанной на рис. 8а, вследствие большей кратности корней $P_{1,2out}$. Влияние потенциала на входном электроде на энергии узлов учитывается так же, как и в (28). Рассчитанные передаточные характеристики при напряжениях питания $V_0 = 0,1$ В и $V_0 = 0,2$ В приведены на рис. 11. Видно, что в этом случае коэффициент усиления существенно выше, чем у более простой структуры. Выбраны следующие параметры: $\varepsilon_1^0 = 0,1$ эВ, $\varepsilon_2^0 = 0$, $\tau = 0,1$ эВ, $\tau_1 = 0,2$ эВ, $\Gamma = 0,01$ эВ и $\alpha = 0,5$ для $V_0 = 0,1$ В, а также $\varepsilon_1^0 = 0,2$ эВ, $\varepsilon_2^0 = 0$, $\tau = 0,225$ эВ, $\tau_1 = 0,375$ эВ, $\Gamma = 0,01$ эВ и $\alpha = 0,5$ для $V_0 = 0,2$ В.

Таким образом, в этом разделе мы продемонстрировали возможность построения квантовых аналогов КМОП-инверторов на основе простейших квантовых структур, обладающих как резонансами, так и антирезонансами, и наметили пути оптимизации их параметров и характеристик.

5. Заключение

В последнее время наблюдается значительный рост интереса к квантовым технологиям. Рассмотренные в настоящей статье квантовые аналоги КМОП-вентилей представляют собой пример использования квантовых принципов для решения задач развития традиционной элементной базы, реализующей булевы логические функции для выполнения вычислений в рамках подхода, сформулированного ещё фон Нейманом.

Стремительный прогресс современных информационных технологий обусловлен в первую очередь успехами в развитии именно традиционной элементной базы. Даже если квантовые компьютеры, использующие совершенно иные принципы, на основе запутанных состояний квантовых битов — кубитов, будут созданы, они будут применяться для решения весьма ограниченного круга задач, оставив чрезвычайно широкое поле деятельности для традиционных вычислительных устройств. Уже в ближайшие десятилетия номинальная вычислительная мощность традиционных вычислительных устройств (грубо её можно оценить как число логических вентилей в микросхеме) сравняется с мощностью человеческого мозга, что открывает необыкновенно широкие перспективы для работ по искусственному интеллекту и может в корне изменить наш мир.

Следует подчеркнуть, что квантовые молекулярные вентили, рассмотренные в разделе 4, сформированы из элементов, представляющих собой, по сути, квантовые полевые транзисторы, и, следовательно, они могут использоваться для реализации компьютеров с архитектурой, отличной от архитектуры фон Неймана, что ещё более расширяет возможную область их применения. Решающее условие для внедрения молекулярных вентилей — создание технологии литографии с атомной точностью. Если такая технология будет создана (на что направлены огромные усилия и ресурсы), то широкое внедрение молекулярной элементной базы станет фактически неизбежным. При этом под молекулой мы понимаем любой химически стабильный объект с размерами порядка одного или нескольких нанометров, характеризующийся дискретным энергетическим спектром. Исследование свойств таких объектов, прежде когерентного квантового транспорта, а также принципов и правил проектирования и построения вычислительных устройств на их основе представляет собой важную для развития элементной базы информационных технологий задачу.

Работа выполнена в рамках государственного задания Физического института им. П.Н. Лебедева РАН и при частичной поддержке программой Президиума РАН.

Список литературы

1. Hu C C *Modern Semiconductor Devices for Integrated Circuits* (Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2010)
2. Horowitz P, Hill W *The Art of Electronics* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1989)
3. Gorbatsevich A A et al. *Phys. Low-Dim. Struct.* (4) 5 (1994)
4. Горбацевич А А и др. *Микроэлектроника* **23** 17 (1994)
5. Горбацевич А А и др. *Электронная промышленность* (4) 28 (1995)

6. Горбачевич А А, Капаев В В, Копаев Ю В *ЖЭТФ* **107** 1320 (1995); Gorbatshevich A A, Kapayev V V, Kopyayev Yu V *JETP* **80** 734 (1995)
7. Prince B *Vertical 3D Memory Technologies* (Chichester: John Wiley and Sons, 2014)
8. International Technology Roadmap for Semiconductors 2015, <http://www.itrs2.net/>
9. Горбачевич А А, Шубин Н М *Письма в ЖЭТФ* **103** 866 (2016); Gorbatshevich A A, Shubin N M *JETP Lett.* **103** 769 (2016)
10. Gorbatshevich A A, Shubin N M *Ann. Physics* **376** 353 (2017)
11. Gorbatshevich A A, Shubin N M *Phys. Rev. B* **96** 205441 (2017)
12. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика: нерелятивистская теория*. Т. 3 (М.: Физматлит, 2013); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* Vol. 3 (Oxford: Elsevier, 2013)
13. Lindblad G *Commun. Math. Phys.* **48** 119 (1976)
14. Brasil C A, Fanchini F F, R Napolitano R de J *Rev. Bras. Ensino Fís.* **35** (1) 01 (2013)
15. Kurobe A et al. *Semicond. Sci. Technol.* **9** 1744 (1994)
16. Birjulin P I et al. *Semicond. Sci. Technol.* **12** 427 (1997)
17. Валиев К А *УФН* **175** 3 (2005); Valiev K A *Phys. Usp.* **48** 1 (2005)
18. Joachim C, Renaud N, Hliwa M *Adv. Mater.* **24** 312 (2012)
19. Hatano N et al. *Prog. Theor. Phys.* **119** 187 (2008)
20. Feshbach H *Ann. Physics* **5** 357 (1958)
21. Feshbach H *Ann. Physics* **19** 287 (1962)
22. Feshbach H *Ann. Physics* **43** 410 (1967)
23. Siegert A J F *Phys. Rev.* **56** 750 (1939)
24. Sasada K, Hatano N, Ordóñez G J *Phys. Soc. Jpn.* **80** 104707 (2011)
25. Fano U *Phys. Rev.* **124** 1866 (1961)
26. Mies F H, Krauss M J *Chem. Phys.* **45** 4455 (1966)
27. Mies F H *Phys. Rev.* **175** 164 (1968)
28. Moldauer P A *Phys. Rev. Lett.* **18** 249 (1967)
29. Müller M et al. *Phys. Rev. E* **52** 5961 (1995)
30. Persson E, Rotter I *Phys. Rev. C* **59** 164 (1999)
31. Persson E et al. *Phys. Rev. Lett.* **85** 2478 (2000)
32. Moiseyev N *Non-Hermitian Quantum Mechanics* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2011)
33. Miroshnichenko A E, Flach S, Kivshar Yu S *Rev. Mod. Phys.* **82** 2257 (2010)
34. Monticone F, Alù A *Rep. Prog. Phys.* **80** 36401 (2017)
35. Hsu C W et al. *Nature Rev. Mater.* **1** 16048 (2016)
36. Breit G, Wigner E *Phys. Rev.* **49** 519 (1936)
37. Klaiman S, Moiseyev N J *Phys. B* **43** 185205 (2010)
38. Romo R, García-Calderón G *Phys. Rev. B* **49** 14016 (1994)
39. Драгунов В П, Неизвестный И Г, Гридчин В А *Основы наноэлектроники* (М.: Логос, 2006)
40. Горбачевич А А, Журавлев М Н, Капаев В В *ЖЭТФ* **134** 338 (2008); Gorbatshevich A A, Zhuravlev M N, Kapayev V V *JETP* **107** 288 (2008)
41. Vanroose W et al. *J. Phys. A* **30** 5543 (1997)
42. Vanroose W et al. *Phys. Rev. A* **64** 62708 (2001)
43. Heiss W D, Wunner G *Eur. Phys. J. D* **68** 284 (2014)
44. Ambichl P et al. *Phys. Rev. X* **3** 041030 (2013)
45. Chong Y D, Ge L, Stone A D *Phys. Rev. Lett.* **106** 93902 (2011)
46. Aharonov Y, Bohm D *Phys. Rev.* **115** 485 (1959)
47. Bender C M, Boettcher S *Phys. Rev. Lett.* **80** 5243 (1998)
48. Bender C M, Boettcher S, Meisinger P N J *Math. Phys.* **40** 2201 (1999)
49. Bender C M *Rep. Prog. Phys.* **70** 947 (2007)
50. Mostafazadeh A J *Math. Phys.* **43** 205 (2002)
51. Mostafazadeh A J *Math. Phys.* **43** 2814 (2002)
52. Mostafazadeh A J *Math. Phys.* **43** 3944 (2002)
53. Зябловский А А и др. *УФН* **184** 1177 (2014); Zyablovsky A A et al. *Phys. Usp.* **57** 1063 (2014)
54. Eleuch H, Rotter I *Eur. Phys. J. D* **69** 229 (2015)
55. Eleuch H, Rotter I *Eur. Phys. J. D* **69** 230 (2015)
56. Kato T *Perturbation Theory for Linear Operators* (Berlin: Springer, 1995)
57. Mandal I *Europhys. Lett.* **110** 67005 (2015)
58. San-Jose P et al. *Sci. Rep.* **6** 21427 (2016)
59. Kreibich M et al. *Phys. Rev. A* **87** 051601(R) (2013)
60. Chitchev N M et al. *Phys. Rev. Lett.* **109** 150405 (2012)
61. Guo A et al. *Phys. Rev. Lett.* **103** 093902 (2009)
62. Regensburger A et al. *Nature* **488** 167 (2012)
63. Bittner S et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 24101 (2012)
64. Alaeian H, Dionne J A *Phys. Rev. A* **89** 33829 (2014)
65. Mostafazadeh A *Ann. Physics* **368** 56 (2016)
66. Liertz M et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 173901 (2012)
67. Brandstetter M et al. *Nature Commun.* **5** 4034 (2014)
68. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Электродинамика сплошных сред* (М.: Физматлит, 2003); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Electrodynamics of Continuous Media* (Oxford: Elsevier, 2013)
69. Zyablovsky A A et al. *Phys. Rev. A* **89** 33808 (2014)
70. Cannata F, Dedonder J-P, Ventura A *Ann. Physics* **322** 397 (2007)
71. Jin L, Song Z *Phys. Rev. A* **81** 32109 (2010)
72. Jin L, Song Z J *Phys. A* **44** 375304 (2011)
73. Hernandez-Coronado H, Krejčíř D, Siegl P *Phys. Lett. A* **375** 2149 (2011)
74. Datta S *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997)
75. Büttiker M *Phys. Rev. Lett.* **57** 1761 (1986)
76. Theis T N, Solomon P M *Proc. IEEE* **98** 2005 (2010)
77. Ionescu A M, Riel H *Nature* **479** 329 (2011)
78. Celardo G L, Kaplan L *Phys. Rev. B* **79** 155108 (2009)
79. Celardo G L et al. *Phys. Rev. B* **82** 165437 (2010)
80. Nitzan A, Ratner M A *Science* **300** 1384 (2003)
81. Kergueris C et al. *Phys. Rev. B* **59** 12505 (1999)
82. Papadopoulos T A, Grace I M, Lambert C J *Phys. Rev. B* **74** 193306 (2006)
83. Kaasbjerg K, Flensberg K *Nano Lett.* **8** 3809 (2008)
84. Osorio E A et al. *Nano Lett.* **7** 3336 (2007)
85. Puczkarski P et al. *Appl. Phys. Lett.* **107** 133105 (2015)
86. Perrin M L et al. *Nature Nanotechnol.* **8** 282 (2013)
87. Mizuta H, Tanoue T *The Physics and Applications of Resonant Tunneling Diodes* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2006)
88. Li Y et al. *Sci. Rep.* **6** 33686 (2016)
89. Stafford C A, Cardamone D M, Mazumdar S *Nanotechnology* **18** 424014 (2007)
90. Горбачевич А А, Журавлев М Н, Катаева Т С *Микроэлектроника* **46** 451 (2017); Gorbatshevich A A, Zhuravlev M N, Kataeva T S *Russ. Microelectronics* **46** 414 (2017)
91. Miroshnichenko A E, Kivshar Yu S *Phys. Rev. E* **72** 056611 (2005)
92. Dente A D, Bustos-Marín R A, Pastawski H M *Phys. Rev. A* **78** 062116 (2008)

Quantum logic gates

A.A. Gorbatshevich⁽¹⁾, N.M. Shubin^(1,2)

⁽¹⁾ Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Leninskii prosp. 53, 119991 Moscow, Russian Federation

⁽²⁾ Moscow State Institute of Electronic Technology (Technical University), pl. Shokina 1, 124498 Zelenograd, Moscow, Russian Federation

E-mail: ⁽¹⁾aagor137@mail.ru, aag.qdn@mee.ru, ^(1,2)n.s.vanderveer@gmail.com

This paper reviews how solid-state or molecular structures in which information transformation processes are governed by quantum mechanical principles can be used to construct logic gates which, similar to classical complementary metal-oxide semiconductor (CMOS), structures do not consume power when in a stationary state. In the first generation quantum analogs of CMOS gates, logical state switching occurs by fast quantum-mechanical tunneling processes, but the transfer characteristics are determined by classical diffusion-drift carrier transport. The second generation quantum analogs of CMOS schemes are open quantum systems in which charge carrier transport occurs coherently. The development of atomic precision lithography technology will allow wide use of quantum molecular logic gates in traditional computer architectures.

Keywords: quantum transport, resonant tunneling, quantum interference, non-Hermitian Hamiltonian, *PT*-symmetry, exceptional point, coalescence of resonances, logic gates, complementary metal-oxide semiconductor (CMOS) transistor, quantum inverter, switching voltage, transfer characteristics, nanoelectronics, molecular electronics

PACS numbers: 03.65.Nk, 03.65.Xp, **85.35. – p**, **85.65. + h**

Bibliography — 92 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **188** (11) 1209–1225 (2018)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.12.038310>

Received 13 December 2017

Physics – Uspekhi **61** (11) (2018)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2017.12.038310>