

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОПЕТРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА

ІВАНОВ Микита Анатолійович

УДК 531:530.145

ДИНАМІЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ РЕЗОНАНСНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат

дисертації на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

Дніпропетровськ – 2016

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Дніпропетровському національному університеті імені Олеся Гончара Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Скалозуб Володимир Васильович,
Дніпропетровський національний
університет імені Олеся Гончара,
завідувач кафедри теоретичної фізики.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Анчишкін Дмитро Владленович,
Інститут теоретичної фізики імені
М.М. Боголюбова НАН України,
провідний науковий співробітник відділу
фізики високих густин енергії.

доктор фізико-математичних наук, старший
науковий співробітник
Нурмагамбетов Олексій Юрійович,
Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера
Національного наукового центру
«Харківський фізико-технічний інститут»
НАН України,
провідний науковий співробітник

Захист відбудеться «30» червня 2016 р. о 14⁰⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 08.051.02 Дніпропетровського національного університету імені Олеся Гончара за адресою: 49010, м. Дніпропетровськ, вул. Наукова, 9, корпус 12, ауд. 512.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Дніпропетровського національного університету імені Олеся Гончара за адресою: 49010, м. Дніпропетровськ, вул. Казакова, 8.

Автореферат розісланий «27» травня 2016 р.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради



Галдіна О.М.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. В умовах бурхливого розвитку нанотехнологій, що охопив в даний час багато галузей науки і техніки, велика увага приділяється дослідженню фізичних і хімічних властивостей низькорозмірних квантових систем, глобул і кластерів. Маніпуляції з окремими атомами та їх групами при створенні й отриманні нових конструкційних матеріалів, напівпровідникових приладів, пристроїв для запису і передачі інформації вважають перспективними напрямками сучасної електроніки. Усе це відкриває нові можливості й горизонти технологічного прогресу. У цих умовах стає особливо актуальною можливість математичного моделювання мезоскопічних об'єктів з метою дослідження їх структури, передбачення поведінки в різних умовах, прогнозування та оцінки перспектив отримання матеріалів з наперед заданими властивостями. Єдиним існуючим способом дослідження динамічних властивостей відкритих мезоскопічних систем є дослідження процесу тунелювання крізь них хвильових пакетів та порівняння параметрів початкових сигналів із параметрами сигналів, що виходять із системи.

Актуальність теми дослідження полягає в тому, що опис процесу тунелювання вимагає побудови моделі, що буде універсальною для більшості квантових систем та видів сигналів. Для розв'язку проблеми на сучасному етапі широко застосовуються чисельні розрахунки та моделювання, що базується на внутрішніх особливостях конкретної досліджуваної системи. Значною проблемою в цьому є складна залежність між формою початкового пакету та параметрами квантової системи. Крім того, існує необхідність враховувати численні квантові і граничні ефекти, пов'язані із суперпозицією падаючої і відбитої хвиль. Аналіз процесу також ускладнюється необхідністю врахування резонансного характеру тунелювання.

Все більша кількість електронних приладів включає до свого складу такі елементи як квантові точки, двобар'єрні діоди та транзистори квантового тунелювання. Характерною рисою таких об'єктів є наявність квантової ями на діаграмі потенціальної енергії.

Значних результатів в цьому напрямі вдалося досягти, застосувавши модифікований метод перевалу та використовуючи безрозмірні змінні при описі процесу тунелювання в поєднанні з формалізмом матриці розсіювання. Такий підхід дав можливість зробити універсальним опис тунелювання широких та вузьких хвильових пакетів, крім того, врахувати вплив на процес всіх особливостей як системи, так і пакету.

Зв'язок роботи з науковими програмами та темами. Дисертаційна робота виконана в рамках держбюджетних дослідних робіт, що проводилися в Дніпропетровському національному університеті імені Олеся Гончара в НДЛ квантової хромоплазми: «Квантові процеси і фазові переходи в екстремальних зовнішніх умовах» (№ держреєстрації 0110U001283), «Змінні

спостереження для нових елементарних частинок та процесів в екстремальних зовнішніх умовах» (№ держреєстрації 0113U003031).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є застосування формалізованого підходу (на основі модифікованого методу перевалу та формалізму матриці розсіювання) для дослідження динамічних характеристик квантових систем. У дисертації було виконано такі **завдання**:

1. Застосування модифікованого методу перевалу в поєднанні з введенням безрозмірних змінних в задачі проходження пакетів прямокутної та гаусової форми крізь квантову систему, яка описана в термінах матриці розсіювання.
2. Застосування сучасних обчислювальних методів для розрахунку форми, аргументу хвильової функції та часу затримки розглянутих сигналів при тунелюванні крізь квантові системи з резонансними рівнями.
3. Порівняння результатів тунелювання пакетів гаусової та прямокутної форм. Встановлення оптимальних параметрів тунельованих пакетів.
4. Дослідження динамічних характеристик пакетів, що виходять з квантової системи, таких як фаза та час затримки сигналів, в залежності від параметрів системи та первісних пакетів.
5. Дослідження тунелювання гаусового пакету крізь широко застосовуваний на практиці квантовий діод.

Об'єктом дослідження є процес тунелювання хвильових пакетів крізь відкриті квантові системи.

Предмет дослідження – це, по-перше, параметри системи і пакету, що впливають на процес тунелювання, і, по-друге, визначення параметрів пакету, що виходить з квантової системи.

Методи дослідження. У процесі дослідження використовувались засоби аналітичного та чисельного обчислення. На основі квантової теорії розсіювання, модифікованого методу перевалу було розроблено пакет для системи комп'ютерної алгебри Maple, за допомогою якого проведено теоретичний аналіз, побудовано матрицю розсіювання квантового діоду та виконано аналітичні розрахунки.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертації одержано такі наукові результати:

1. Вперше визначено повний набір параметрів системи і пакету, достатніх для опису процесу та всіх властивостей тунелювання.
2. Розроблено програмні засоби, що дають змогу аналізувати та досліджувати процес тунелювання хвильових пакетів прямокутної та гаусової форм крізь квантові системи з резонансними рівнями, які є базою сучасної мікроелектроніки.

3. Отримано аналітичні співвідношення для визначення форми тунельованого пакету в залежності від параметрів початкового пакету та квантової системи, що дає змогу аналізувати динамічні характеристики тунелювання, такі як час затримки та фаза хвильової функції пакету, що виходить з системи.
4. Модифікований метод перевалу розповсюджено на системи з великою шириною резонансних рівнів. На прикладі хвильового пакету гаусової форми усунено втрату малих гармонік за рахунок врахування більшої кількості членів асимптотичного розвинення.
5. Розглянуто випадок тунелювання хвильового пакету гаусової форми крізь існуючу на практиці структуру – квантовий діод, що має широке застосування в сучасній електроніці.
6. Розраховані основні динамічні характеристики тунелювання пакетів крізь квантову точку та тунельний діод, які є типовими елементами мікроелектронних приладів. На основі цих систем можна розглядати процес проходження хвильових пакетів крізь більш складні структури.

Практичне значення отриманих результатів. Розроблені програмні засоби дають можливість детального аналізу процесу тунелювання сигналів різноманітних форм крізь відкриті квантові системи. Розраховано аргумент хвильової функції пакету, що виходить з системи і, як наслідок, час затримки сигналу. Це дає широкі можливості підбору оптимальних параметрів системи (за необхідності її створення) чи сигналу (на випадок вже існуючої системи) з метою підвищення швидкості тунелювання.

Особистий внесок здобувача. Розробку програмних пакетів, проведення аналізу та обчислень виконано здобувачем самостійно. Ідеї, засади та методи вирішення наукових задач, а також напрямки проведення досліджень обговорювались із науковим керівником професором В. В. Скалозубом.

Ступінь достовірності наукових результатів. Достовірність наукових результатів, представлених у дисертаційній роботі, досягнуто наступним чином:

- використанням загальновідомих аналітичних підходів квантової теорії розсіювання, таких як метод матриці розсіювання та асимптотичні методи;
- чисельним моделюванням з використанням програмних засобів Maple;
- порівнянням результатів аналітичних розрахунків з асимптотичними результатами і встановленням того факту, що вони співпадають з великим ступенем точності.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дослідження доповідалися на наукових конференціях:

1. II Міжнародна наукова конференція «Наноструктурні матеріали-2010: Білорусь-Росія-Україна» (НАНО-2010), 19-22 жовтня 2010 року, Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова України, м. Київ [6].
2. Міжнародна школа-семінар «New Physics and Quantum Chromodynamics at External Conditions», 3-6 травня 2011 року, Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара, м. Дніпропетровськ [10].
3. Міжнародна конференція «Quantum Electrodynamics and Statistical Physics», 29 серпня – 2 вересня 2011 року, Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут», м. Харків [9].
4. Міжнародна школа-семінар «New Physics and Quantum Chromodynamics at External Conditions», 22-24 травня 2013 року, Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара, м. Дніпропетровськ [7].
5. XV міжнародна конференція «Mathematical Methods in Electromagnetic Theory» (ММЕТ-2014), 26-28 серпня 2014 року, м. Дніпропетровськ [8].

Публікації. Результати дослідження опубліковано в 2 статтях у міжнародних журналах [1,4], 3 статтях у фахових вітчизняних виданнях [2,3,5] і 5 збірниках тез наукових конференцій [6-10].

Структура дисертації. Робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел з 90 найменувань. Обсяг дисертації – 115 сторінок машинописного тексту з урахуванням 29 рисунків.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** описано історичні передумови поставленої проблеми, обґрунтовується актуальність та мета роботи.

Перший розділ дисертаційної роботи присвячено огляду проблеми опису процесу проходження хвильових пакетів крізь квантові системи та пошуку динамічних характеристик тунелювання. У підрозділі 1.1 наводяться основні сучасні методи опису квантових систем, такі як метод матриці переносу, квазікласичний метод, метод тунельного гамільтоніану і метод матриці розсіювання. Вони дозволяють розглядати систему максимально узагальнено та враховувати всі особливості, такі як коефіцієнти проходження і відбиття, а також наявність резонансних рівнів енергії. Підрозділ 1.2 присвячено опису процесу тунелювання хвильових пакетів крізь найпростіші квантові системи, такі як потенційний бар'єр та квантова яма, які є складовими елементами більш складних енергетичних структур. При русі частинок в квантових системах спостерігається ефект тунелювання хвильового пакета крізь систему. Тунелювання – подолання мікрочастинкою потенціального бар'єру у випадку, коли її повна енергія менша за висоту

бар'єра. Тунельний ефект, явище виключно квантової природи, неможливе в класичній механіці. Найпростішим прикладом тунелювання, є проходження хвильового пакета крізь прямокутний потенціальний бар'єр. У процесі взаємодії з бар'єром пакет, залишаючись цілим, розпливається на складові, які розглядаються як відбитий хвильовий пакет зліва від бар'єра, загасаюча і зростаюча хвилі під бар'єром і тунельований пакет праворуч від бар'єру. Через досить великий проміжок часу залишаються тільки відбитий хвильовий пакет та пакет, що проходить крізь систему, які розходяться в протилежні сторони на великих відстанях від бар'єру. Якщо енергія частинки E більше висоти бар'єру U , то показник заломлення

$$n = \frac{\sqrt{2m[E - U(x)]}}{\hbar k_0} \quad (1)$$

є дійсним. У цьому випадку ймовірність тунелювання не дорівнює нулю, на відміну від класичної теорії. Однак, вона експоненційно зменшується в залежності від ширини бар'єру. У випадку тунелювання крізь квантову яму показник заломлення представляє собою уявну величину, отже тунелювання носить яскраво виражений резонансний характер. Він залежить як від параметрів вхідного сигналу, так і від параметрів системи, таких як ширина і кількість резонансних рівнів, геометричні особливості системи. Крім того, резонансний характер тунелювання дуже сильно залежить від ідентичності бар'єрів, що обмежують квантову яму, а отже визначають наявність стаціонарних станів. У підрозділі 1.3 наведено визначення основних динамічних характеристик процесу тунелювання, таких як аргумент хвильової функції пакету, що виходить з системи, та його взаємозв'язок із часом затримки сигналу в системі.

Другий розділ даної роботи присвячено дослідженню проблеми тунелювання хвильових пакетів крізь квантову систему. В якості системи, яка досліджується, вибрана квантова точка, що містить один резонансний рівень енергії. Підрозділ 2.1 присвячено опису використовуваного модифікованого методу перевалу та дослідженню, в загальному вигляді, тунелювання хвильових пакетів форм крізь систему з одним резонансним рівнем. Для опису квантової системи використано формалізм матриці розсіювання, що дозволяє встановити залежність між вхідним сигналом та сигналом, який отримано після виходу з системи, за допомогою наступного співвідношення

$$\psi_a^{\text{out}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_b \int_{-\infty}^{\infty} \psi_a^{\text{in}} S_{b,a} dk, \quad (2)$$

де Ψ^{in} – хвильова функція вхідного пакету, Ψ^{out} – хвильова функція пакету, що виходить, S – матриця розсіювання, яка складається з резонансної S^{res} та

фонової S^{bg} частин, інтегрування проводиться за всім імпульсним простором. Резонансна частина матриці розсіювання пов'язана з наявністю резонансного рівня енергії з шириною Γ , що існує завдяки наявності квантової ями на діаграмі потенціальної енергії. На випадок системи, що містить N резонансних рівнів, можемо записати

$$S(k) = \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{\hbar^2(k_j - i\Gamma_j/2)} \frac{i\Gamma_j/2}{k - k_j + i\Gamma_j/2} S^{res} + S^{bg} - \frac{m}{\hbar^2(k_j - i\Gamma_j/2)} \frac{i\Gamma_j}{4k_j - 2i\Gamma_j} \right]. \quad (3)$$

Для опису системи використаємо безрозмірні змінні:

$$q' = \frac{x}{a}, \quad \tau = \frac{t}{t_a}, \quad S = a(k - k_0), \quad l_j = ak_j, \quad \rho_j = a\frac{\Gamma_j}{2}, \quad l_0 = ak_0, \quad (4)$$

де t_a – часова тривалість пакета, l_j та l_0 – положення особливої точки і центру хвильового пакету відповідно, а ρ_j – ширина j -го резонансу. Враховуючи що a – ширина хвильового пакету, отримаємо, що всі характеристики проходження будуть вимірюватися в термінах хвильового пакету, що падає. Параметрами координати і часу стають q і τ відповідно. Ширина падаючого сигналу стала одиничною. Подання квантової системи в термінах, що характеризують хвильовий пакет, дає достатнє число параметрів для опису процесу проходження. Причинами вибору наведеної параметризації стало те, що раніше розв'язання задач відповідної проблематики наводилося в термінах вузьких та широких хвильових пакетів (залежно від ширини пакетів і геометричних характеристик системи), а це робило використовувані підходи не універсальними.

У зв'язку з цим, опис геометричних характеристик системи відбувався в термінах характеристик початкового пакета (його ширини). Як наслідок, всі сигнали мають одиничну ширину, що дозволяє узагальнити даний підхід і поширити його на хвильові пакети довільної ширини. Це дозволить описувати характеристики системи в термінах вихідного пакету та відійти від окремого розгляду вузьких та широких хвильових пакетів, оскільки в безрозмірних змінних пакет матиме одиничну довжину. У нових позначеннях пакет, що виходить з системи, буде описуватись виразом

$$\Psi(q > 0, \tau) = \sum_j \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} e^{il_0\left[q - \frac{l_0\tau}{2}\right]} \int_{-\infty}^{\infty} (f_j^{res}(s)e^{g_j^{res}(s)} + f_j^{bg}(s)e^{g_j^{bg}(s)}) ds. \quad (5)$$

Згідно з розвинутим методом, інтегрування слід виконувати за допомогою методу перевалу, де параметром розвинення є τ , що представляє собою відношення часу, через який розглядається пакет, що виходить із системи, до тривалості початкового пакету. Беручи до уваги, що це відношення має велике значення, можна застосувати метод перевалу.

Знайдемо корені рівняння $g^{\text{res}}(s) = 0$. Ті з них, які задовольняють умовам стаціонарності

$$\text{Im } g(s) = \text{const}, \quad \text{Re } g(s) < \text{Re } g(s_k), \quad (6)$$

і є шуканими точками перевалу. Вони дозволяють отримати головний внесок до інтегралу.

Підрозділи 2.2 та 2.3 присвячені дослідженню процесу тунелювання хвильових пакетів гаусової та прямокутної форм крізь квантову систему з одним резонансним рівнем. При розгляді проходження хвильового пакету гаусової форми, було встановлено, що ця задача вирішується без застосування асимптотичних методів. Це дозволило провести порівняння результатів застосування модифікованого методу перевалу із її точним розв'язком.

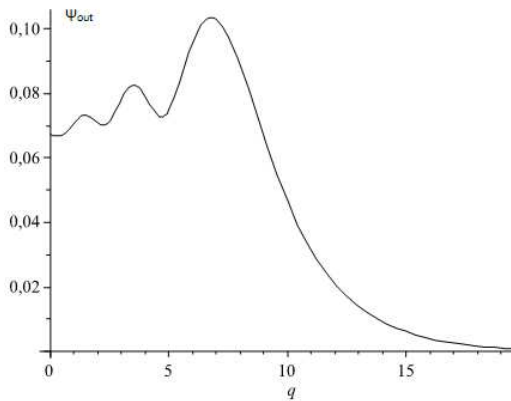


Рис. 1

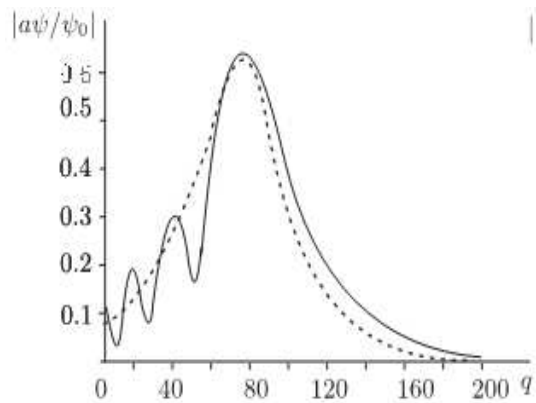


Рис. 2

Рис. 1. Форма хвильового пакету, що виходить з системи при подачі сигналу гаусової форми при $\Gamma_0=0.02$, $\tau=300$, $k_1=1$, $k_0=6$

Рис. 2. Графіки функцій $|\psi^{\text{sp}}(q)|$ (пунктирна лінія), що отримано методом перевалу для головного члена ряду, та функції $|\psi^{\text{ex}}(q)|$ (суцільна лінія) що описує точний розв'язок, у випадку тунелювання пакету гаусової форми при $\tau=100$, $a_1=1$, $l_0=l_1=1$, $\rho=0.09$

Ця обставина дає можливість для детального дослідження процесу, оскільки тунелювання пакету гаусової форми – точно розв'язувана задача. Описуючи сигнал, що подається, у вигляді суперпозиції гаусових пакетів, можна отримати точні аналітичні розв'язки для широкого кола практично важливих задач. Суперпозиція гаусових пакетів дозволяє формувати з них прямокутний пакет. Чим більшу кількість гаусіан буде використано, тим точніше пакет буде набувати рис прямокутного сигналу. Варіюючи їх кількість, можна задавати різну ширину пакета, що подається на вхід

системи. Кількість використовуваних гаусіан не впливає на хід обчислень, але збільшує час розрахунків. У роботі детально досліджено випадок прямокутного пакету, представленого суперпозицією трьох сигналів гаусової форми. Результати зіставлені з відповідними результатами для гаусового хвильового пакету з тими ж характеристиками (імпульсом та шириною).

За результатами дослідження було встановлено, що при досить малих значеннях ширини енергії резонансного рівня застосування модифікованого методу перевалу дає дуже добре узгодження з точним розв'язком вже для першого члена асимптотичного розкладу. При значеннях більших за деяку величину може спостерігатися втрата малих гармонік хвильової функції пакета, що виходить з системи (рис. 2). Результат можна уточнити при врахуванні більшої кількості членів асимптотичного ряду. Показано збіг результатів, отриманих точним чисельним і асимптотичним методами. Фактично це означає, що виділені всі аналітичні особливості амплітуди проходження. Детально досліджено випадок прямокутного пакету, представленого суперпозицією трьох гаусових сигналів. Результати було зіставлені з відповідними результатами для гаусового сигналу з тими ж характеристиками. Як можна побачити з рис. 1 та рис. 3, прямокутний пакет демонструє набагато більшу стабільність, ніж гаусовий. Крім того, центр мас прямокутного пакета за той самий час спостерігається на відстані в два рази більшій, ніж центр мас для гаусового пакету. Це означає, що швидкість тунелювання першого пакету приблизно в два рази перевищує швидкість останнього.

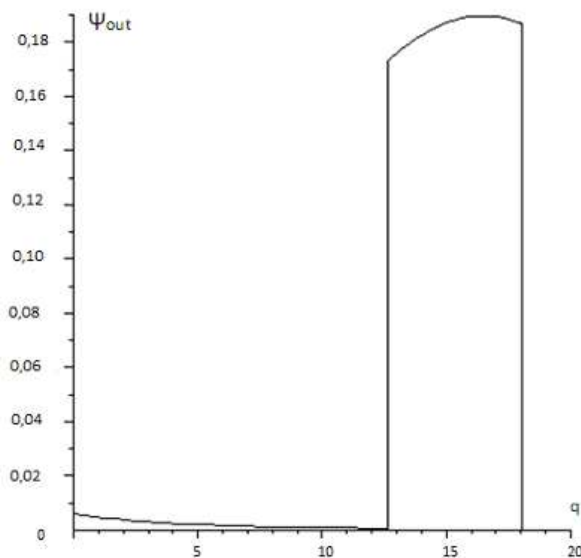


Рис. 3

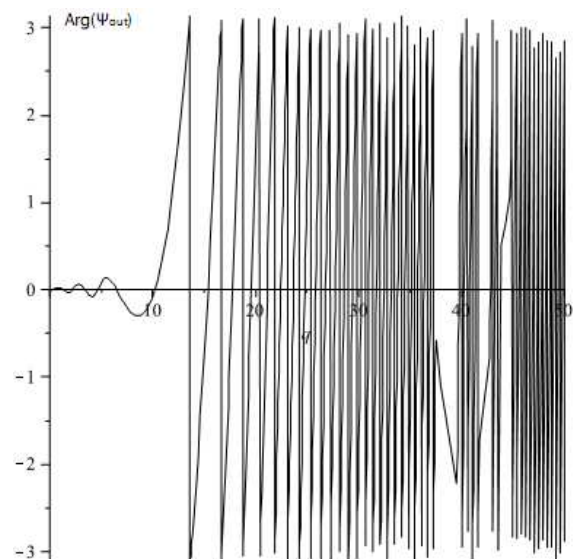


Рис. 4

Рис. 3. Форма хвильового пакету, що виходить з системи при подачі прямокутного сигналу, який представляє суперпозицію трьох пакетів гаусової форми при $\Gamma_0=0.02$, $\tau=300$, $k_1=1$, $k_0=6$

Рис. 4. Аргумент хвильової функції пакету, що виходить, при подачі сигналу гаусової форми при $\Gamma_0=0.02$, $\tau=300$, $k_1=1$, $k_0=6$

В третьому розділі роботи, у підрозділі 3.1 розвинутий метод поширено на квантові системи з довільною кількістю резонансних рівнів. Показано, що форма потенціальної енергії системи має безпосередній вплив на процес тунелювання. Наведено методику побудови матриці розсіювання для довільної системи за відомою діаграмою її потенціальної енергії. На основі наведеної методики обчислено матрицю розсіювання широко застосовуваного на практиці квантового діоду. Великий інтерес представляє дослідження процесу тунелювання крізь більш складну структуру, що має практичне застосування в сучасній електроніці. Підрозділ 3.2 присвячено саме цій проблематиці. Потенційна діаграма досліджуваної системи має наступний вигляд

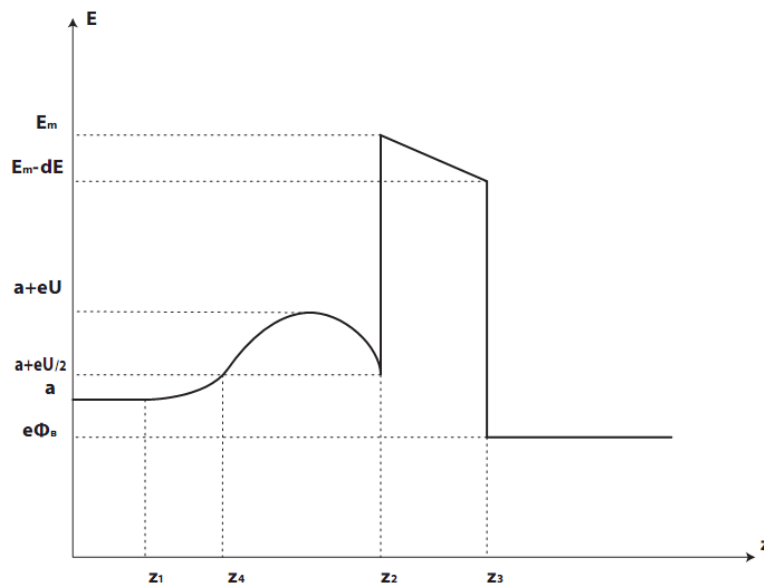


Рис. 5. Діаграма потенціальної енергії досліджуваного діоду

Матрицю розсіювання даної системи було побудовано наступним чином. Потенціальна енергія системи розглядалася як суперпозиція збудованої і незбудованої частин

$$V(z) = \Delta V(z) + V_0(z). \quad (7)$$

Для незбудованої частини розв'язано рівняння Шрьодінгера, та знайдено відповідні хвильові функції. Після чого було розраховано амплітуди кожної з них та відповідні до кожної області системи функції Гріна рівняння

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} - V_0(z) + \nu \right] \Gamma(z, z', \nu) = \delta(z - z'). \quad (8)$$

Наступним кроком знайдено амплітуди відбиття і проходження для випадку збуреної частини потенціальної енергії. Вони в свою чергу є розв'язками рівняння Ліппмана-Швінгера

$$\Psi(z, \nu) = \Psi_0(z, \nu) + \int_{-b_1}^{b_1} dz' T(z, z', \nu) \Delta V(z') \Psi(z', \nu). \quad (9)$$

Після того, як були знайдено власні хвильові функції, можна побудувати матрицю власних станів, за допомогою якої обчислюється матриця розсіювання S системи

$$S = (R\Psi^+ - \Psi^{+'})^{-1} (R\Psi^- - \Psi^{-'}), \quad (10)$$

де

$$R = \Psi'(z, \nu) \Psi^{-1}(z, \nu). \quad (11)$$

За допомогою отриманої матриці було досліджено процес тунелювання сигналу гаусової форми крізь задану структуру.

Представлятимемо $S(l)$ у вигляді експоненти

$$S(l) = e^{\ln(S(l))}.$$

Тоді форма хвильового пакету, що виходить з квантової системи, буде мати наступний інтегральний вигляд

$$\Psi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\Phi(s)} ds,$$

де показник експоненти

$$\Phi(s) = \frac{1}{\tau} \left[i s q' - \left(\beta - \frac{1}{2} \right) s^2 + \ln(S(l)) + \ln(\Psi_0(s)) \right].$$

Для аналітичного обчислення інтегралу було застосовано метод перевалу. Зазвичай точка перевалу обчислюється без урахування члена $\ln(S)$. При такому виборі фази особливості амплітуди, обумовлені полюсною структурою, що пов'язана з квантовою системою, залишаються прихованими. У нашому випадку повна інформація про квантову систему входить у вираз для $\Phi(s)$ і, відповідно, в рівняння. Тому всі особливості амплітуди як аналітичної функції будуть знайдені з отриманого рівняння.

Четвертий розділ роботи присвячений дослідженню основних динамічних характеристик процесу тунелювання. Розвинутий підхід застосовано для дослідження часу затримки та аргументу хвильової функції

пакетів, що виходять з квантової системи. Обчислено та порівняно основні динамічні характеристики тунелювання хвильових пакетів гаусової та прямокутної форм у випадку тунелювання крізь квантову точку та квантовий діод. Визначення часу затримки хвильового пакету в системі являє собою різницю між часом, за який сигнал проходить задану відстань при своєму вільному поширенні, і часом, за який цю ж відстань буде пройдено за наявності потенційного бар'єра. Згідно із запропонованим Вігнером визначенням, час затримки сигналу в системі пов'язаний з аргументом хвильової функції пакета, що виходить з системи ($\text{Arg}(\Psi)$), наступним співвідношенням

$$\Delta t = \frac{d\text{Arg}(\Psi)}{dE}. \quad (12)$$

На основі запропонованого методу аналітично розраховано хвильову функцію пакета, який було отримано на виході з системи. Це дало можливість досліджувати динамічні характеристики тунелювання, такі як аргумент хвильової функції (рис. 4) та час затримки сигналу в системі (рис. 6 та рис. 7).

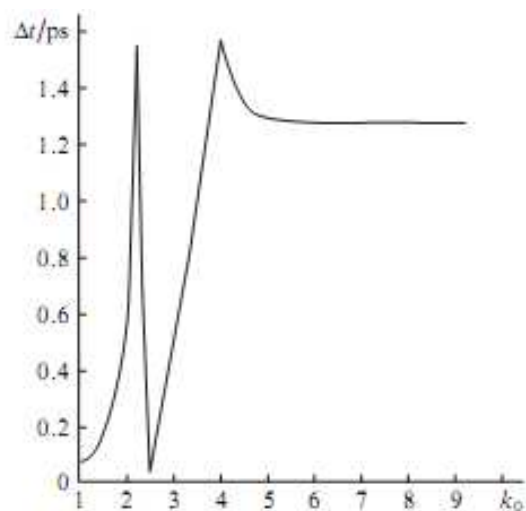


Рис. 6

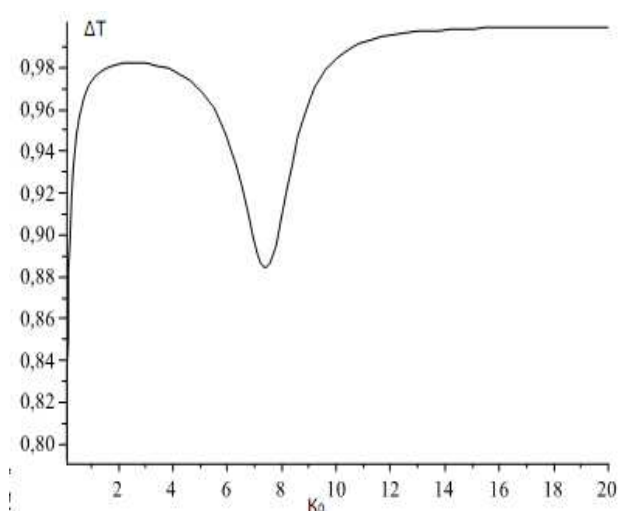


Рис.7

Рис. 6. Час затримки хвильового пакету при проходженні сигналу гаусової форми крізь діод, залежно від імпульсу сигналу, що подається k_0 при $\Gamma=1$, $k_1=1$, $k_2=3$, $k_3=4$, $k_4=4$, $k_5=1$

Рис.7. Час затримки в залежності від імпульсу пакета прямокутної форми, представленого у вигляді суперпозиції трьох гаусових пакетів при тунелюванні крізь квантову точку $\Gamma_0=0.02$, $\tau=300$, $k_1=1$, $q=30$

Результати тунелювання хвильового пакета гаусової форми, отримані за допомогою асимптотичного методу перевалу, було співставлено з результатами, отриманими точним інтегруванням. Точний розв'язок представляє собою суперпозицію стандартних функцій помилки.

Таким чином, продемонстровано істотну перевагу аналітичного методу. Розраховано аргумент хвильової функції пакету, що виходить з квантової точки та квантового діоду, при тунелюванні сигналів гаусової та прямокутної форм. Для деяких значень імпульсу початкового хвильового пакету спостерігається мінімальний час затримки, що відповідає максимальній швидкості тунелювання даного пакета крізь досліджувану структуру. Подальша зміна імпульсу не призводить до зменшення часу затримки. При досягненні деякого значення збільшення імпульсу не відбивається істотно на часі затримки пакета. В залежності від енергетичних характеристик даної системи можна спостерігати одну або декілька смуг резонансного тунелювання. Тобто в рамках однієї системи можна домогтися високої швидкості пропускання пакетів кількох різних імпульсних характеристик, що, зокрема, може знайти своє застосування при шифруванні даних, що передаються.

ВИСНОВКИ

У дисертації розв'язано ряд актуальних проблем з дослідження динамічних характеристик тунелювання хвильових пакетів крізь квантові системи.

1. Розроблено програмні засоби, що дають змогу за даними параметрами квантової системи (геометричні розміри, потенційна діаграма, ширина і кількість резонансних рівнів) та початкового пакету (що задається імпульсом, геометричною формою, просторовою та часовою тривалістю), детально дослідити динамічні характеристики тунелювання.
2. Розповсюджено область застосовності даного методу на випадок систем, що характеризуються великою шириною резонансних рівнів. Це дає змогу більш формалізованого розгляду задач, що вивчаються.
3. При дослідженні проходження хвильового пакету гаусової форми крізь квантову систему з одним резонансним рівнем було продемонстровано, що застосований модифікований метод перевалу показав високий ступінь збігу результатів з точним розв'язком.
4. Досліджено процес тунелювання хвильового пакету гаусової форми крізь широко застосовувану на практиці структуру – квантовий діод. Досліджено вплив параметрів пакету та структури на час затримки сигналу в системі.
5. Показано, що при різних характеристиках системи можуть спостерігатися такі явища як повне внутрішнє розсіювання

(надвеликий час затримки), а також існування однієї або декількох смуг резонансного тунелювання.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Иванов Н.А. Прохождение волновых пакетов через квантовые системы с резонансными уровнями / Н.А. Иванов, В.В. Скалозуб // ТМФ. – 2011. – Т. 168, №2. – С. 281–290.
2. Ivanov N.A. Transmission of wave packets through open mesoscopic system / N.A. Ivanov, V.V. Skalozub // Problems of Atomic Science and Technology. – 2012. – Vol. 1. – P. 292-295.
3. Іванов М.А. Час затримки хвильових пакетів при проходженні квантових систем з резонансними рівнями / М.А. Іванов, В.В. Скалозуб // Вісник Дніпропетровського університету. – 2010. – вип. 17. – С.34-39.
4. Ivanov N.A. Time delay of wave packets during their tunnelling through a quantum diode / N.A. Ivanov, V.V. Skalozub // Quantum Electronics. - 2014. – Vol. 44 (4). – P. 387–391.
5. Ivanov N.A. Tunneling of rectangular wave packages through resonant quantum systems / N.A. Ivanov, V.V. Skalozub // Visnyk Dnipropetrovskoho universytetu. Fizyka. Radioelektronika. – 2014. – Vol. 22. – P.46-52.
6. Иванов Н.А. Время задержки волновых пакетов при туннелировании квантовых систем / Н.А. Иванов, В.В. Скалозуб // Наноструктурные материалы-2010. Полупроводниковые наносистемы и наноструктуры. (Киев, Украина, 19-22 октября 2010), Тезисы конференции. – С. 421
7. Ivanov N.A. Tunneling of a wave-package through a quantum diode / N.A. Ivanov and V.V. Skalozub // International school-seminar «New Physics and Quantum Chromodynamics at External Conditions» (Dnipropetrovsk, Ukraine, May 22 – 24, 2013), Conference Proceedings. – 2013. – P. 124-126.
8. Ivanov N.A. Tunneling of rectangular wave-package through the quantum system with resonance levels / N.A. Ivanov and V.V. Skalozub // XV international conference «Mathematical Methods in Electromagnetic Theory» (Dnipropetrovsk, Ukraine, 26-28 august 2014), Conference Proceedings. – 2014. – P. 87-92.

9. Ivanov N.A. Transmission of wave packets through open mesoscopic systems/ N.A. Ivanov and V.V. Skalozub // III international conference «Quantum Electrodynamics and Statistical Physics» (Kharkov, august 29 – september 2, 2011), Conference Proceedings. – 2011. – P.292-295.
10. Ivanov N.A. Tunneling of a wave-package through an opened quantum system / N.A. Ivanov and V.V. Skalozub // International school-seminar «New Physics and Quantum Chromodynamics at External Conditions» (Dnipropetrovsk, Ukraine, May 3-6, 2011), Conference Proceedings. – 2011. – P. 56-61.

АНОТАЦІЯ

Іванов М.А. Динамічні закономірності резонансних квантових систем. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальності 01.04.02 – теоретична фізика. – Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара, МОН України, Дніпропетровськ, 2016.

Дисертацію присвячено дослідженню процесів тунелювання хвильових пакетів різних форм крізь квантові системи з резонансними рівнями. На основі модифікованого методу перевалу, формалізму матриці розсіювання із застосуванням безрозмірних змінних описано процес тунелювання хвильових пакетів гаусової та прямокутної форм. В якості досліджуваних систем виступали квантова точка та квантовий діод. За допомогою відомих засобів аналітичних обчислень із застосуванням сучасних пакетів математичних програм було побудовано пакет для обчислення форми, аргументу хвильової функції та часу затримки сигналів при тунелюванні запропонованих систем. Було детально досліджено залежність часу затримки від параметрів системи і початкового пакету. Розглянуто представлення прямокутного пакету як за допомогою Θ -функцій Хевісайда, так і за допомогою суперпозиції функцій Гауса. Виконано порівняння розрахунків, отриманих за допомогою асимптотичних методів та прямого інтегрування. Уточнено механізм застосування розглянутого методу на випадок систем з великою шириною резонансного рівня. Показано, що при деяких значеннях параметрів системи та пакету можуть відбуватися явища повного внутрішнього розсіювання, резонансного тунелювання в одній або декількох частотних смугах. Порівняно результати тунелювання пакетів прямокутної та гаусової форм при однакових значеннях імпульсу та ширини крізь квантову точку. Показано, що пакет прямокутної форми при тунелюванні виявив більшу стабільність форми та вдвічі менший час затримки.

Ключові слова: тунелювання, хвильовий пакет, час затримки, квантова система, діод, хвильова функція, каналювання.

АННОТАЦИЯ

Иванов Н.А. Динамические закономерности резонансных квантовых систем. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара, МОН Украины, Днепропетровск, 2016.

Диссертация посвящена исследованию процессов туннелирования волновых пакетов различных форм через квантовые системы с резонансными уровнями. На основе модифицированного метода седловой точки, формализма матрицы рассеяния с использованием безразмерных переменных описывается туннелирование волновых пакетов гауссовой и прямоугольной форм. В качестве исследуемых систем выступали квантовая точка и квантовый диод.

Объектом исследования является процесс туннелирования волновых пакетов через открытые квантовые системы с резонансными уровнями. Предмет исследования – параметры системы и пакета, оказывающие влияние на процесс туннелирования, а также определение динамических характеристик выходящего из системы пакета. В качестве методов исследования использовались известные средства аналитических и численных вычислений, основанные на квантовой теории рассеяния. С помощью известных средств аналитических вычислений с применением современных пакетов математических программ был создан пакет для вычисления формы, аргумента волновой функции и времени задержки сигналов при туннелировании предложенных систем.

Детально исследована зависимость времени задержки от параметров системы и начального пакета. Рассмотрены представления прямоугольного пакета как с помощью Θ -функций Хэвисайда, так и с помощью функций Гаусса. Выполнено сравнение расчетов с помощью асимптотических методов и прямого интегрирования. Уточнен механизм применения рассматриваемого метода в случае систем с большой шириной резонансного уровня. Показано, что при некоторых значениях параметров системы и пакета могут происходить явления полного внутреннего рассеяния, а также резонансного туннелирования в одной или нескольких частотных полосах. Сравнивались результаты туннелирования пакетов прямоугольной и гауссовой форм с одинаковыми значениями импульса и ширины через квантовую точку. Показано, что пакет прямоугольной формы при туннелировании проявил большую стабильность формы и имел вдвое меньшее время задержки.

Исследовалось туннелирование волнового пакета гауссовой формы через квантовый диод. При некоторых значениях импульса подаваемого волнового пакета наблюдалось минимальное время задержки, что

соответствует максимальной скорости туннелирования. При этом дальнейшее увеличение импульса подаваемого сигнала не приводит к существенному уменьшению времени задержки. В зависимости от энергетических характеристик исследуемой системы наблюдались одна или несколько полос резонансного туннелирования.

Ключевые слова: туннелирование, волновой пакет, время задержки, квантовая система, диод, волновая функция, каналирование.

ABSTRACT

Ivanov N.A. Dynamic regularities of resonant quantum systems. – Manuscript.

Candidate's thesis on Physics and Mathematics, speciality 01.04.02 – theoretical physics. – Oles Honchar Dnipropetrovsk National University, Ministry of Education of Ukraine, Dnipropetrovsk, 2016.

Dissertation is dedicated to research of wave packets tunneling through various forms of quantum systems with resonant levels. The work is based on several basic principles. The first one is using the dimensionless variables. This principle lets us describe the system parameters in terms of incident packet parameters. The second principle is the modified method of the saddle point. The third principle is using formalism of the scattering matrix. We study tunneling of Gaussian and rectangular wave packets. We consider open quantum systems, such as quantum dots and quantum diodes. We utilize popular means of analytical calculations based on mathematical software packages. A piece of software for calculation of the shape and the argument of a wave packet and the time delay of the signal during tunneling through the proposed systems was created. We study the dependency of various parameters of the system and the initial packet. We consider both the Heaviside Θ -function representation and the Gaussian function representation for the rectangular packet. The calculation results obtained by using asymptotic methods and direct integration are compared. We also discuss and clarify the application of this method in case of systems with wide resonance level. It is shown that for different system and package parameters one may observe such effects as total internal scattering or resonant tunneling in one or more frequency bands. We compare the results obtained for rectangular and a Gaussian packets with the same momentum and pulse-width values in the case of a quantum dot. We show that for the rectangular packet the shape is more stable and the time delay is half the value for the Gaussian case.

Keywords: tunneling, wave packet, time delay, quantum system, diode, wave function, channeling.

Підписано до друку 26.05.2016 р. Формат 60*84 1/16.
Папір офсетний. Друк цифровий. Гарнітура “Times New Roman”.
Ум. др. арк. 0,9. Тираж 100 прим. Зам. № 97.

Друкарня “Ліра ЛТД”
вул. Наукова, 5, м. Дніпропетровськ, 49050.
Свідоцтво про внесення до Держреєстру ДК №188 від 19.09.2000