Міністерство освіти і науки України
Дніпропетровський національний університет
імені Олеся Гончара

На правах рукопису

ІВАНОВ Микита Анатолійович

УДК 531:530.145

ДИНАМІЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ РЕЗОНАНСНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ

01.04.02 – теоретична фізика

Дисертація на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник:

д. ф.-м. н., професор Скалозуб В.В.

Дніпропетровськ – 2016

Зміст

Введення

Існує велика кількість сучасних технологій, які потребують використання елементної бази з заздалегідь визначеними динамічними властивостями. Виходячи з відомого закону Мура, найбільш вигідне число транзисторів на кристалі подвоюється щороку. Як наслідок, встає питання застосування все менших і менших приладів в сучасній електроніці. Такі сучасні науки, як нанотехніка та наноелектроніка мають справу з об'єктами, характерні розміри яких відносяться до нанометрового діапазону. Властивості таких об'єктів (до них відносяться, крім того атоми, молекули та інші мікрочастинки) описуються квантовою механікою. Найбільший інтерес у нанометровому діапазоні викликає його нижня межа від 100 нм і нижче аж до атомного рівня (0,2 нм), оскільки в цьому діапазоні властивості речовин можуть значно відрізнятися від їх властивостей в макровзірцях. Це пов'язано з двома обставинами. По-перше, зростає роль поверхні і поверхневих ефектів, по-друге, починають проявлятися різні квантові ефекти. Квантові ефекти призводять до значних змін оптичних, електричних і магнітних властивостей речовин. Перспективи маніпуляції з окремими атомами і їх групами при створенні та отриманні нових конструкційних матеріалів, напівпровідникових приладів, пристроїв для запису і передачі інформації відкривають нові можливості і горизонти технологічного прогресу. Причиною цього є фізичні властивості цих систем, значною мірою обумовлені квантовою природою процесів, що в них відбуваються.

Одним з перших, проблему тунелювання частинок крізь потенціальний бар'єр дослідив Г. Гамов у 1928 р. розвиваючи теорію альфа-розпаду. В роботі [57] ним було наголошено, що для детального вивчення цього процесу в першу чергу необхідно знати форму потенціального бар'єру крізь який тунелює досліджувана частинка. В цьому ж році вийшла робота Фаулера та Нордгейма [58], що на засадах квантової механіки досліджувала процес холодної емісії електронів в металах. Задача тунелювання, крізь подвійний потенціальний бар'єр вперше була розв’язана в наближенні Вентцеля-Крамерса-Бріллюена (ВКБ) Девідом Бомом у 1951 р [59], який вказав, що резонанси коефіцієнта передачі відбуваються за певних значень початкової енергії електронів. Виявилося, що для деяких енергій коефіцієнт передачі дорівнює одиниці, тобто подвійний бар'єр цілком прозорий для передачі частинок. Це явище отримало назву резонансного тунелювання. Пізніше, у 1964 році, Л. В. Іогансен [51] обговорював можливість резонансного проходження електронів крізь подвійні бар'єри, утворені в напівпровідникових кристалах. Розвиток електроніки підійшов до використання процесів тунелювання лише майже десять років потому: з'явилися тунельні діоди, відкриті японським вченим Л. Есакі [38], який за це відкриття отримав Нобелівську премію у 1973 р. Величезна кількість наукової літератури, присвяченої математичному моделюванню нано-об'єктів [13, 14], вказує на актуальність вивчення таких систем. Такого роду системи цікаві як з фундаментальної точки зору, як об'єкти, на яких можна перевірити особливості макроскопічних квантових ефектів, наприклад, ефект Ааронова-Бома [60] та можливості існування незгасаючих струмів.

З огляду на те, що все більша кількість електронних приладів включає до свого складу такі елементи, як квантові точки, двубар’єрні діоди та транзистори квантового тунелювання, характерною рисою яких є наявність квантової ями в діаграмі потенціальної енергії, аналіз процесу ускладнюється необхідністю врахування резонансного характеру тунелювання. Теоретичне та експериментальне дослідження розповсюдження хвильових пакетів крізь подібні квантові структури, це проблема, інтерес до якої не вщухає декілька останніх десятиліть. 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.

З квантової теорії випливає ряд принципів, що мають основоположне значення для наноелектроніки. Перший з них це квантування. Він полягає у тому, що деякі фізичні величини, що описують мікрооб’єкт, за деяких умов приймають лише дискретні значення. Так, наприклад кантується енергія електрона, при його русі в області простору, розмір якої можна порівняти з довжиною хвилі де Бройля для цієї частинки. Квантування енергії електрона означає, що вона може мати лише деякий дискретний набір значень, кожному з яких співставлено своє значення енергетичного рівня, відповідне даному стаціонарному стану.

Значних результатів в напрямі опису процесу тунелювання вдалося досягти, поєднавши модифікований метод перевалу, використання безрозмірних змінних в поєднанні із формалізмом матриці розсіювання. Такий підхід дав можливість зробити універсальним опис процесу тунелювання широких та вузьких хвильових пакетів. Крім того, він дав можливість врахувати вплив на процес всіх особливостей як системи так і пакету.

Актуальність теми дослідження. В умовах бурхливого розвитку нанотехнологій, що охопив в даний час багато галузей науки і техніки, велика увага приділяється дослідженню фізичних і хімічних властивостей низько розмірних квантових систем, глобул і кластерів. Маніпуляції з окремими атомами і їх групами при створенні та отриманні нових конструкційних матеріалів, напівпровідникових приладів, пристроїв для запису і передачі інформації вважають перспективними напрямками сучасної електроніки. Усе це відкриває нові можливості і 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 порівнянні параметрів початкових сигналів із параметрами сигналів, що виходять із системи.

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, двубар'єрні діоди та транзистори квантового тунелювання. Характерною рисою таких об'єктів є наявність квантової ями діаграми потенціальної енергії.

Мета роботи. Метою роботи є розробка та застосування формалізованого підходу (на основі модифікованого методу перевалу та формалізму матриці розсіювання), для дослідження динамічних характеристик квантових систем. Об'єктом дослідження дисертації 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 пакета що виходить з квантової системи.

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).

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

1. Визначено повний набір параметрів системи і пакету, що описують процес та всі властивості тунелювання.
2. Розроблено програмні засоби, що дають змогу аналізувати та досліджувати процес тунелювання хвильових пакетів прямокутної та гаусової форм крізь відкриті квантові системи з резонансними рівнями, що 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.
4. Показано співпадіння результатів, отриманих точним та асимптотичним методами у випадку тунелювання хвильового пакету гаусової форми крізь квантову систему, що містить один резонансний рівень;
5. Розширено модифікований метод перевалу, для систем з великою шириною резонансних рівнів. На прикладі хвильового пакету

гаусової форми була усунена втрата малих гармонік за рахунок врахування більшої кількості членів асимптотичного розвинення.

6. Розглянуто випадок тунелювання хвильового пакету гаусової форми крізь існуючу на практиці структуру – квантовий діод, що має широке застосування в сучасній електроніці.

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.

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 [44].
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 [45].

3. Міжнародна конференція “Quantum Electrodynamics and Statistical Physics”, 29 серпня – 2 вересня 2011 року, Національний науковий центр “Харківський фізико-технічний інститут“, м. Харків [48].

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 [47].

5. XV міжнародна конференція “Mathematical Methods in Electromagnetic Theory“ (MMET-2014), 26-28 серпня 2014 року,м. Дніпропетровськ [46].

Публікації. Результати дослідження опубліковано в 5 статтях у міжнародних журналах [39–43] і 5 збірниках тез наукових конференцій [44–48].

Структура дисертації. Робота складається зі вступу, чотирьох розділів та висновків. Вона містить 29 рисунків. Обсяг дисертації 115 сторінок машинописного тексту, список використаних джерел (90 найменувань)

Основні результати. 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. Розширено 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 високу ступінь збіжності 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.

Розділ 1. Огляд літератури

Даний розділ присвячено основним методам опису квантових систем та процесів тунелювання хвильових пакетів крізь них. Детально розглядаються методи тунельного гамільтоніану, матриці переносу (що є дуже поширеним при розгляді тунелювання крізь багатошарові структури), квазікласичний метод в наближенні Вентцеля-Крамерса-Бріллюена (ВКБ). Для кожного з розглянутих методів описано модель руху хвильового пакету крізь систему. Приведено приклади резонансного та нерезонансного тунелювання, та наводяться приклади практичного застосування цього явища в техніці. Також описуються основні характеристики тунелювання та умови, що призводять до прозорості бар'єрних шарів. Наводяться основні проблеми, пов'язані з описом процессу тунелювання. Показана залежність часу затримки хвильового пакету в системі (за Вігнером) від параметрів хвильового пакету та системи. Основні результати за тематикою розділу представлено в роботах [1,2,4–21,29–31].

1.1 Опис квантових систем

В умовах нанотехнологічної революції, що охопила в даний час багато галузей науки і техніки, величезна увага приділяється дослідженню фізичних і хімічних властивостей низькорозмірних квантових систем, глобул і кластерів [1,2,6–11]. Експерименти показують залежність фізичних властивостей нанорозмірних і мезоскопічних об'єктів від розмірів наночастинок і кластерів, але універсальна залежність поки не встановлена. Перспективи маніпуляції з окремими атомами і їх групами при створенні та отриманні нових конструкційних матеріалів, напівпровідникових приладів, пристроїв для запису і передачі інформації відкривають нові можливості і горизонти технологічного прогресу [7–12]. 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. Експериментальні роботи останніх років говорять про значний прогрес у створенні подібних систем. В даний час вдається отримувати як окремі квантові об'єкти, так і цілі організовані конгломерати низьковимірних систем. Тим не менш, неослабний інтерес з точки зору дослідження квантових явищ представляють саме окремі "базові" об'єкти, такі як квантові точки та квантові кільця.

Можливості практичного використання такого роду систем пов'язані, наприклад, з сучасними тенденціями мініатюризації елементної бази та створенням оптоелектронних приладів, в яких передача сигналу здійснюється проходженням невеликої групи заряджених частинок або навіть окремих електронів. Як відомо, процес проникнення частинок крізь відповідні бар'єри в нанокластери – це процес тунелювання і дослідження закономірностей такого процесу являє безумовний інтерес для розробки і проектування оптоелектронних приладів. Моделювання передачі сигналу в подібних системах неможливо без тимчасового опису процесів тунелювання, що означає необхідність розгляду нестаціонарної задачі. У зв'язку з цим актуальними стають дослідження часової динаміки хвильових функцій електронів у квантових точках, квантових діодах і транзисторах квантового тунелювання.

У ряді робіт стверджувалося, що розв'язок проблеми опису процесу тунелювання хвильового пакета крізь квантову систему з резонансними рівнями є нездійсненним [15]. Це пояснювалося з тим, що зв'язок подаваного пакету і пакету, що виходить з системи пакету описувалася складними математичними співвідношеннями (залежними від параметрів системи і пакета) і можливістю отримання розбіжних частин при інтегруванні.

В роботах [5,13–20] вказується, що для опису процесу тунелювання використовуються підходи, засновані на теорії квантового переносу, теорії ефективної маси, а також квантової статистики, заснованої на матриці щільності, функції Гріна і функції Вігнера. Ми зупинимо свій розгляд на чотирьох основних. Це метод матриці переносу, квазікласичний метод, метод тунельного гамільтоніана та метод матриці розсіювання.

Метод матриці переносу

Метод матриць переносу [16–20] є широко поширеним методом розрахунку оптичних властивостей шаруватих структур. У разі шаруватого середовища задачі про поширення світла в шаруватій структурі і знаходженні частот власних оптичних [16] і поляритонних [18] мод шаруватої структури зводяться до перемноження матриць переносу крізь окремі шари, з яких складається структура. Для лінійного середовища матриці переносу мають розмірність 2 × 2. Конкретний вигляд матриць визначається вибором пари параметрів (базису), що описують електромагнітне поле. Найбільш часто в якості базису використовуються тангенціальні по відношенню до межі розділу двох середовищ компоненти електричного і магнітного полів [18], або амплітуди хвиль, що поширюються в протилежних напрямках [19]. У випадку, коли на якому-небудь шарі має місце змішування різних хвиль (наприклад, на решітці квантових дротів, де змішуються падаюча і дифрагуюча хвилі), матриця переносу має розмірність, рівну подвоєному числу хвиль, що змішуються [20].

Матриця переносу вводиться як матриця, що пов'язує розв’язок досліджуваного рівняння в областях, що знаходяться зовні бар’єру – просторових інтервалах, на яких потенціальна енергія дорівнює нулю, а ефективна маса частинки дорівнює масі вільної частинки. Для будь-якого кусково-гладкого потенціалу, а також для δ - потенціалів, матриця переносу P, записується у вигляді

$$P = \begin{vmatrix} q & y \\ y* & q* \end{vmatrix},$$

де

$$q = \frac{1}{\sqrt{T}} e^{i(k_0(b-a)-J)} \quad \textit{ma} \quad y = \sqrt{\frac{R}{T}} e^{i(\frac{\pi}{2}-k_0(b+a)+F)},$$

в яких: T и R - відповідно, коефіцієнти проходження та відбиття ($T + R = 1$); J и F – фазові характеристики; k_0 – хвильове число хвилі де Бройля, яка описує частинку в областях, що знаходяться зліва та справа від бар'єру; a і b – координати лівої і правої меж бар'єру, відповідно.

Відмінною рисою даного підходу є виділення внесків $k_0(b-a)$ и $k_0(b+a)$ у виразах для фаз матричних елементів q та y. Фаза F є, в деякому розумінні, мірою асиметрії потенціальних бар'єрів, оскільки для бар'єрів симетричної форми вона може приймати лише два значення 0 або π. Для параметрів розсіювання T, J і F прямокутних потенціальних бар'єрів (ям) і δ -потенціалів отримані явні аналітичні вирази [19], а для багатобар'єрних структур отримані рекурентні співвідношення [20]. А саме, якщо потенціальні бар'єри розташовані в інтервалах $[a_n, b_n]$

$$T_{(1,n+1)} = \frac{T_{(1,n)} T_{n+1}}{T_{(1,n)} T_{n+1} + \left(\sqrt{R_{(1,n)}} - \sqrt{R_{n+1}}\right)^2 + 4\sqrt{R_{(1,n)} R_{n+1}} \cos^2 \chi_{(1,n+1)}}$$

$$J_{(1,n+1)} = \frac{1}{2}\left(J_{(1,n)} + J_{n+1} - F_{(1,n)} + F_{n+1}\right) + \\ + arctg\left[\frac{1-\sqrt{R_{(1,n)} R_{n+1}}}{1+\sqrt{R_{(1,n)} R_{n+1}}} tg\left(\chi_{(1,n+1)}\right)\right] + \eta,$$

$$J_{(1,n+1)} = \frac{1}{2}\left(F_{(1,n)} + J_{n+1} - J_{(1,n)} + F_{n+1}\right) + \\ + arctg\left[\frac{1-\sqrt{R_{(1,n)} R_{n+1}}}{1+\sqrt{R_{(1,n)} R_{n+1}}} tg\left(\chi_{(1,n+1)}\right)\right] + \eta,$$

$$\chi_{(1,n+1)}=\frac{1}{2}\left(F_{(1,n)}+J_{n+1}+J_{(1,n)}-F_{n+1}\right)+\eta;$$

$$l_{(1,n+1)}=a_{(1.n+1)}-b_n;$$

$\eta=0$, якщо $cos(\chi_{(1,n+1)})\geq 0$ або $\eta=\pi$; величини зі складним індексом характеризують n–бар'єрну структуру, а з простим індексом n–ий потенціальний бар'єр.

Одним з плюсів цих співвідношень є те, що вони чисельно стійкі [19], і, що особливо важливо, вони зручні для аналітичних досліджень. Зокрема, саме на їх основі побудовані точні моделі розсіювання частинки на самоподібному фрактальному потенціалі і потенціалі у формі функції канторових сходів. Крім того, на їх основі можна отримати умови прозорості для одновимірних структур загального вигляду. А саме, для частинки з енергією E двобар'єрна система повністю прозора, якщо одночасно виконуються дві умови

$$R_1(E)=R_2(E)=R(E) \text{ та } R(E)cos(\chi_{(1,n+1)})=0.$$

Якщо при цьому $R(E)\neq 0$, то друга умова приймає вигляд

$$J_1+J_2+F_1-F_2+2k_0l_{(1,2)}=\pi(2n+1);\quad n=0;\pm 1;\pm 2...$$

Умові прозорості можна дати наочну фізичну інтерпретацію, якщо ввести поняття "фазових точок повороту" – точок на осі OX, в яких фази падаючої і відбитої хвиль збігаються. Для хвилі, падаючої на бар'єр зліва, ці точки мають координати

$$x_l=a+\left(J-F-\frac{\pi}{2}+2\pi n\right)/2k_0,$$

де n - ціле число. Для хвилі, падаючої зліва

$$x_r = b - \left(J + F - \frac{\pi}{2} + 2\pi n \right) / 2k_0 .$$

Нехай f_l – сумарний фазовий шлях падаючої зліва на бар'єр вільної хвилі де-Бройля від лівої межі бар'єру до фазової точки повороту, ефективно замінює бар'єр, і відбитої хвилі від точки повороту назад до лівої межі бар'єру. Нескладно показати, що (з точністю до $2\pi n$) $f_l = J - F - \pi/2$. Аналогічний фазовий шлях f_r для хвилі, що падає на бар'єр праворуч, визначається виразом $f_r = J + F - \pi / 2$. В результаті умову прозорості можна записати у вигляді

$$f_r^1 + f_l^2 + 2k_0 l_{(1,2)} = 2\pi n; \quad n = 0; \pm 1; \pm 2; ...$$

Ліва частина цієї рівності є замкнутий фазовий шлях вільної хвилі де Бройля, укладений між фазовими точками повороту x_r^1 і x_l^2 першого і другого бар'єрів, відповідно. Таким чином, умова прозорості двобар'єрної системи загального вигляду, як і відома умова квантування Бора-Зоммерфельда, має простий фізичний зміст. Однак, на відміну від останнього, умова прозорості є точною.

Перевагою цих співвідношень є те, що вони чисельно стійкі [20], і, що особливо важливо, вони зручні для аналітичних досліджень. Зокрема, саме на їх основі побудовані точні моделі розсіювання частинки на самоподібному фрактальному потенціалі і потенціалі у формі функції канторових сходів. Крім того, на їх основі можна отримати умови прозорості для одновимірних структур загального вигляду.

Як і метод фазових функцій, метод матриці переносу зручний і для аналізу параметрів розсіювання гладких потенціалів.

Метод тунельного гамільтоніана

Наближення тунельного гамільтоніана було вперше введено Оппенгеймером в 1928 році, а потім узагальнено Бардином в 1961 на твердотільні структури [21]. Таке наближення пояснюється тим фактом, що у звичайній тунельній структурі з низькою прозорістю бар'єрів виникає близька до одиниці ймовірність відбиття від бар'єру. Це означає, що зліва від бар'єру хвилі скоріше є стоячими, типу *cos kx*, ніж такими, що біжать – e^{ikx}, теж відбувається і праворуч від бар'єру. Можна вважати, що енергетичний бар'єр розділяє систему на дві майже незалежні частини і слабка взаємодія між ними може трактуватися як збурення. Однак виникає питання про спосіб введення такого доданка в гамільтоніан, щоб він забезпечував існування тунельного струму. Інтерес до наближення тунельного гамільтоніана пов'язаний з тим, що таке наближення дає можливість врахування щільності станів в тунельному струмі. Дійсно, якби був відомий матричний елемент переходу M, тоді ймовірність переходів в одиницю часу визначалася б за золотим правилом Фермі

$$\omega_{1\to 2} = \frac{2\pi}{\hbar}|M|^2 \rho(E_2)\delta(E_1 - E_2).$$

Згідно роботи [21], розглянемо одновимірний прямокутний бар'єр: нехай x_1 і x_2 положення лівої і правої стінок бар'єру. Розглянемо дві підсистеми, на правій (R) і лівій (L) границях бар'єру. Будемо вважати, що прозорість бар'єру вкрай низька, що дозволить побудувати простий наближений розв’язок для точного гамільтоніана H. Наприклад, в квазікласичному наближенні для одноелектронної хвильової функції з лівого контакту можна записати

$$\psi_L = \begin{cases} Ap_x^{-1/2} e^{i[ik_y y + k_z z]} \cos(k_x x + \gamma_L), \ x_1 < x, \\ \\ B|p_x^{-1/2}| e^{i[ik_y y + k_z z]} \cos(-\kappa x), \quad x_1 < x < x_2, \end{cases}$$

де $A=(2k_x/L)^{1/2}$ – нормувальна константа. В області зовні бар'єру $x>x_2$ будемо вважати, що наближене розв’язок прямує до нуля як e^{-kx} замість того, щоб в цій області задовольняти рівнянню Шрьодінгера. Аналогічне припущення робиться і щодо хвильових функцій правої межі

$$\psi_R = \begin{cases} Bp_x^{-1/2} e^{i[ik_y y + k_z z]} \cos(k_x x + \gamma_R), \quad x_1 < x, \\ \\ B|p_x^{-1/2}| e^{i[ik_y y + k_z z]} \cos(\kappa x), \quad x_1 < x < x_2. \end{cases}$$

Таким чином, побудований розв’язок ψ_L, є точним розв’язком з енергією E_L в області $x<x_2$, а розв’язок ψ_R – точним розв’язком задачі з енергією E_R з тим же гамільтоніаном при $x<x_1$. Такий розв’язок задовольняє граничним умовам, накладеним на хвильову функцію. Крім того, точний вигляд розв’язків не принциповий, важлива лише їх просторова локалізація (експоненціальне згасання) у відповідних областях.

Припустимо, що хвильовий пакет спочатку знаходився на лівому електроді в основному стані, описуваному функцією ψ_L. Обчислимо ймовірність переходу пакета в інший стан, що описується функцією ψ_R. Для простоти приймемо, що ці стани єдині в правому і лівому електродах. Тоді

$$\psi(t) = c(t)\psi_L e^{-\frac{iE_L t}{\hbar}} + d(t)\psi_R e^{-\frac{iE_R t}{\hbar}}.$$

І підставимо цей вираз в рівняння Шрьодінгера

$$\frac{i\hbar\partial\psi}{\partial t} = H\psi.$$

Після чого отримуємо вираз

$$\left(i\hbar\frac{d(c(t))}{dt}\psi_L + c(t)\psi_L E_L\right)e^{-\frac{iE_L t}{\hbar}} + \left(i\hbar\frac{d(d(t))}{dt}\psi_R + d(t)\psi_R E_R\right)e^{-\frac{iE_R t}{\hbar}} =$$

$$= c(t)e^{-\frac{iE_L t}{\hbar}}\hat{H}\psi_L + d(t)e^{-\frac{iE_R t}{\hbar}}\hat{H}\psi_R.$$

Розглянемо розпад стану, для якого в момент часу *t = 0* хвильовий пакет був локалізований на лівій межі бар'єру. Тоді слід вважати *c(0)=0* та *d(0)=0*.

З умови нормування повної хвильової функції

$$\frac{d\left(|c|^2 + |d|^2\right)}{dt} = 0,$$

випливає, що $c \approx 0$, тоді

$$i\hbar d = \int \psi_R^*\left(\hat{H} - E_L\right)\psi_L e^{\frac{i(E_R - E_L)t}{\hbar}}dx.$$

Як і в квантовій механіці, похідна коефіцієнтів розкладання за часом повинна визначатися матричним елементом оператора збурення $\hat{H}_T$

$$\int \psi_R^*\left(\hat{H} - E_L\right)\psi_R e^{-\frac{i(E_R - E_L)t}{\hbar}}dx = e^{-\frac{i(E_R - E_L)t}{\hbar}}\int \psi_R^*\hat{H}_T\psi_L dx,$$

тому величину

$$T_{L\to R}=\int\psi_R^*\left(\hat{H}-E_L\right)\psi_L dx$$

можна вважати ефективним матричним елементом тунельного переходу. Цей інтеграл відмінний від нуля при $x>x_2$ і дорівнює нулю при $x<x_2$, оскільки

$$H\psi_L=E_L\psi_L$$

є тотожною рівністю зліва від бар'єра. Це дозволяє обмежити границі інтегрування значенням x_B всередині бар'єру $(x_1 \le x_B \le x_2)$

$$T_{L\to R}=\int_{x_B}^{\infty}\psi_R^*\left(\hat{H}-E_L\right)\psi_L dx.$$

Додавши до цього виразу величину, рівну нулю при $x>x_B$, наприклад,

$$\int_{x_B}^{\infty}\psi_L^*\left(\hat{H}-E_L\right)\psi_R dx=0 \text{ при } \quad x_B\ge x_1$$

Це дозволяє представити отриманий вираз в симетричній формі

$$T_{L\to R}=\int_{x_B}^{\infty}\left[\psi_R^*\left(\hat{H}-E_L\right)\psi_L-\psi_L^*\left(\hat{H}-E_L\right)\psi_R\right]dx, \qquad x_1\le x_B\le x_2.$$

В якості нижньої межі при інтегруванні x_B можна вибрати будь-яке значення всередині бар'єру:

$$T_{L\to R}=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_B}^{\infty}\left(-\psi_R^*\frac{d^2}{dx^2}\psi_L+\psi_L^*\frac{d^2}{dx^2}\psi_R\right)dx+$$
$$+\int_{x_B}^{\infty}\left(\psi_R^*\left(U-E_L\right)\psi_L+\psi_L^*\left(U-E_L\right)\psi_R\right)dx.$$

Враховуючи закон збереження енергії $E_L \approx E_R$, другий доданок в сумі прямує до нуля і ним можна знехтувати. Проінтегрувавши перший доданок, отримаємо

$$T_{L\to R} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\psi_R^* \frac{d}{dx}\psi_L - \psi_L^* \frac{d}{dx}\psi_R\right\}_{x=x_B}.$$

Таким чином, відповідний матричний елемент відповідає квантово-механічному оператору щільності потоку ймовірності

$$T_{L\to R} = -i\hbar j_{L\to R},$$

який повністю визначається парціальними хвильовими функціями всередині бар'єру.

Квазікласичний метод ВКБ для задачі розсіювання

Квазікласичне наближення квантової механіки (Венцеля–Крамерса–Бріллюена метод, або ВКБ метод) – наближений метод знаходження хвильової функції і рівнів енергії квантової системи за умови, що довжина хвилі де Бройля *l* частинок системи багато менше характерних розмірів *R* зміни потенціалу. В умовах квазікласичного наближення квантове співвідношення невизначеностей дозволяє побудувати хвильовий пакет, в якому невизначеності координати та імпульсу набагато менше самих цих величин. Такий пакет буде рухатися, підкоряючись законам класичної механіки з точністю до малих величин порядку *l*/R. У найпростішому випадку точкової частинки з характерною масою m_c заданою енергією *E*, що рухається за законами класичної механіки у зовнішньому полі з потенціальною енергією *U(r)*, модуль імпульсу *p(r)* в даній точці простору *r* дорівнює $p(r)\text{-}[2m(S\text{-}U(r))]^{l/2}$. Довжина хвилі пов'язана з імпульсом співвідношенням де Бройля $l(r)=h/p(r)$. Критерій застосовності даного наближення наступний [30]

$$\left|\nabla\lambda(r)\right| = \frac{\hbar}{p^2}\left|\nabla p(r)\right| << 1.$$

Рух квантової частинки в тих же умовах визначається рівнянням Шрьодінгера

$$\hbar^2\Delta\psi + p^2(r)\psi = 0,$$

де ψ– хвильова функція частинки. В одновимірному випадку (потенціальна енергія і хвильова функція залежать лише від однієї координати *x* наближені розв’язки рівняння в класично доступною області *E>U(x)* мають вигляд

$$\psi(x)=\frac{c}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int pdx},$$

розв’язок являє собою найпростіше узагальнення плоскої хвилі $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ на випадок $p(x)$, що змінюється досить повільно. Передекспоненційний множник забезпечує закон збереження кількості частинок, тобто незалежність потоку кількості частинок від координати. Розв’язок з тією ж точністю справедливий і в класично недосяжній області $E<U(x)$ [22,30]. Однак у цьому випадку величина $p(x)$ стає повністю уявною. Тому один з розв’язків експоненційно спадає, а інший зростає в міру віддалення в класично недосяжну область. Цей розв’язок описує чисто квантовий ефект підбар’ерного проникнення частинок. Критерій не виконується поблизу класичних точок повороту x_0, де $U(x_0)=E$. Якщо $U(x)$ регулярна в точці x_0, то поблизу неї рівняння Шрьодінгера можна приблизно замінити рівнянням з лінійним потенціалом $U(x)=U'(x_0)(x-x_0)$, яке зводиться до рівняння Ейрі. Його розв’язком є

$$\psi=C\sqrt{\frac{\xi}{p(x)}}Z_{\frac{1}{3}}(\xi),$$

де $Z_{\frac{1}{3}}(x)$ будь-який розв’язок рівняння Бесселя з індексом *1/3* та

$$\xi=\int_{x_0}^{x}pdx=\frac{2}{3}\sqrt{-U'(x)}(x-x_0)^{3/2}.$$

Заміна точного рівняння Шрьодінгера наближеним поблизу нулів і особливостей функції $p^2(x)$ носить назву методу еталонних рівнянь [30]. Так, поблизу простого нуля функції $p^2(x)$ еталонним є рівняння Ейрі; якщо близькими виявляються два простих нуля, то еталонним є рівняння параболічного циліндра; при зближенні простого нуля і полюса еталонним виявляється вироджене гіпергеометричне рівняння. У всіх цих випадках відомі аналітичні властивості розв'язків еталонних рівнянь. Можливі й більш складні еталонні рівняння, розв'язок яких поки не досліджені. Розв'язок еталонного рівняння плавно зшиваються з квазікласичними розв'язками, визначаючи тим самим правила переходу через точки повороту. Зокрема, той з розв'язків, який експоненційно зменшується в класично недоступній області, в дозволеної області поводиться як

$$\psi(x) = \frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

де x_0 – класична точка повороту. Якщо класично доступна область обмежена звичайними точками повороту x_1 та x_2, то рівні енергії визначаються правилами квантування Бора - Зоммерфельда:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi\hbar,$$

де n – квантове число, яким нумеруються рівні. При переході до класичної механіки величина n відіграє роль адіабатичного інваріанта [31]. Якщо одна або обидві границі класичного руху близькі до особливостей потенціалу, то в правій частині останнього рівняння замість доданка ½ з'являється не залежить від n стала g, значення якої визначається характером особливості. У 1913 Н. Бор постулював правила квантування і з їх допомогою вперше інтерпретував експериментальні спектри поглинання атомів водню. В силу специфічної симетрії квазікласичних рівнів енергії атома водню збігаються з точними. Нехай потенціальна енергія U (x) така, що є дві області класично дозволеного руху, одна з яких обмежена. Класична частинка, яка перебуває в потенціальній ямі, не зможе покинути її. Але квантова частинка має відмінну від нуля хвильову функцію і в під бар'єрній області. Вихід частинки з потенціальної ями крізь бар'єр є квантовим ефектом, який називається тунелюванням (тунельним проникненням). Ймовірність тунелювання за одиницю часу визначається рівнянням

$$\omega = \upsilon(\varepsilon)\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_2}^{x_3}|p(x)|dx\right),$$

де $\nu(\varepsilon)$ – класична частота руху частинок в потенціальній ямі. Множник $\nu(\varepsilon)$ виникає з умови нормування хвильової функції в класично досяжній області. Уявлення про квантове тунелювання та його кількісні характеристики були вперше застосовані Г.А. Гамовим для пояснення альфа-розпаду. Іншим виключно квантовим ефектом є відбиття потенціальним бар'єром частинки з енергією, більшої висоти бар'єру. Якщо потенціал є аналітичною функцією x, то в квазікласичному наближенні коефіцієнт надбар'єрного відбиття (частина відбитих частинок всього потоку) дорівнює

$$R(\varepsilon) = \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{x_0^*} p(x)dx\right).$$

Інтегрування в показнику експоненти відбувається уздовж контуру в комплексній площині x, що йде з найближчої до дійсної осі комплексної точки повороту x_0^*, комплексно спряженої до точки повороту x_0. Отримані формули застосовні в тому випадку, коли показники експонент великі. Надбар'єрне відбиття є окремим випадком процесу, забороненого класичною механікою. У квантовій механіці такі процеси, взагалі кажучи, можливі, але мають експоненційно малу ймовірність. Класична траєкторія такого процесу, тобто розв’язок варіаційного рівняння $dS=0$, існує, але виявляється комплексним [31]. Комплексною є і дія S уздовж траєкторії.

1.2 Тунелювання хвильових пакетів крізь відкриті квантові системи

Тунелювання хвильового пакету крізь відкриті квантові системи пов'язано з процесами відбиття частини хвильового пакету від границі потенціального бар'єру. Великий вплив на процес тунелювання має можливість взаємодії частини пакета, що проходить з самою системою [27] і відбитою частиною пакету [24].

Хвильовий пакет являє собою певну сукупність хвиль, що характеризуються різними частотами, які описують хвильові властивості формації, в загальному випадку обмеженої в часі і просторі:

$$U(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}A(k)e^{i(kx-\omega(k)t)}dk,$$

де в загальному випадку множник перед експонентою називають амплітудою хвильового пакета. Показник експоненти визначає осциляторний характер функції.

Для опису тунелювання частинок в одному обраному напрямку осі ох хвильової пакет представляють у вигляді суперпозиції стаціонарних хвильових функцій *f(k, x)*, що відповідає частинкам з хвильовим числом *k*, ефективною масою *m* та енергією $E=\hbar^2k^2/2m$ (наприклад, [22 - 26])

$$\psi(x,t)=\int_{0}^{\infty}g(k)f(k,x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}dk,$$

з ваговими коефіцієнтами

$$g(k) = Ce^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\Delta k^2}},$$

де k_0 – середнє значення хвильового числа частинок в пакеті, Δk – параметр ширини пакету, а

$$C = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \Delta k}}$$

– нормувальний множник.

Основними характеристиками хвильового пакету, є його групова швидкість, обумовлена у разі відсутності дисперсії співвідношенням

$$V_0 = \frac{\hbar}{k_o m},$$

де k_0 – імпульс центра мас хвильового пакета, m – маса частинки. Ця швидкість відповідає швидкості переміщення максимуму амплітуди хвильового пакету в просторі. Часовою характеристикою пакету є його тривалість, залежна від його ширини a

$$t_a = \frac{ma^2}{\hbar}.$$

При поширенні в квантових системах спостерігається ефект тунелювання хвильового пакета крізь потенціал системи. Тунелювання – подолання мікрочастинкою потенціального бар'єру у випадку, коли її повна енергія (що залишається при тунелюванні незмінною) менше висоти бар'єра. Тунельний ефект, явище виключно квантової природи, неможливе в класичній механіці. Аналогом тунельного ефекту в хвильовій оптиці може служити проникнення світової хвилі всередину відбиваючого середовища (на відстані порядку довжини світлової хвилі) в умовах, коли, з точки зору геометричної оптики, відбувається повне внутрішнє відбиття. Найпростішим прикладом тунелювання, є проходження хвильового пакета крізь прямокутний потенціальний бар'єр.

Центр цього хвильового пакету виходить з точки $x = x_0$ в момент часу $t=0$, рухається, розпливаючись, уздовж осі x зліва направо зі швидкістю v і за відсутності бар'єра приходить в точку $x=0$ в момент часу $t_0=-x_0/v$. У процесі взаємодії з бар'єром пакет, залишаючись цілим, розпливається на складові [1,14], які розглядаються як відбитий хвильової пакет зліва від бар'єра, загасаюча і зростаюча хвилі під бар'єром і пакет, що виходить з системи праворуч від бар'єру. При $t \rightarrow \infty$ залишаються тільки відбитий і тунелювавший хвильові пакети, що розходяться в протилежні сторони на великих відстанях від бар'єру.

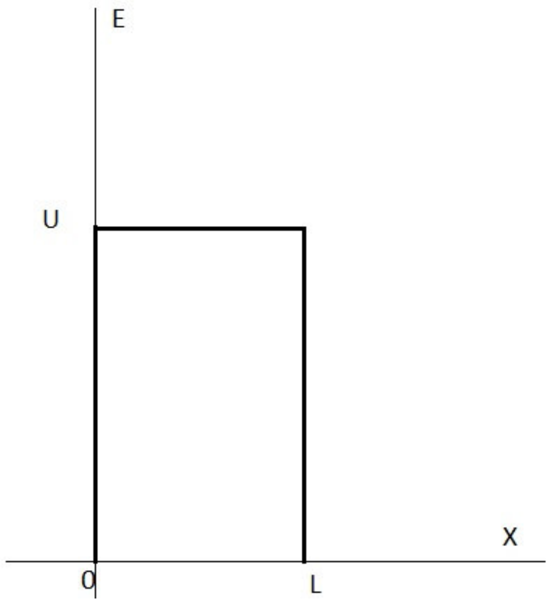


Рис. 1.1. Найпростіший потенціальний бар'єр шириною L за віссю координат x, та висотою потенціальної енергії U відкладеною за віссю E.

Необхідно зауважити, що ця задача є класичною та добре відомою, з курсу квантової механіки, для монохроматичних хвиль. Ми наводимо тут ці результати, враховуючи, що пакет представляє собою суперпозицію хвиль та будемо шукати стаціонарні стани частинки, що рухається в полі такого бар'єру. Позначаючи потенціальну енергію через *U(x)*, ми одержимо рівняння Щрьодінгера у вигляді

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi=E\psi\,.$$

За аналогією з поширенням світлової хвилі, де чинником, що впливає на поширення хвилі є показник заломлення *n*, вводять наступне позначення

$$n=\frac{\sqrt{2m\left[E-U(x)\right]}}{\hbar k_0}\,.$$

У термінах якого можна переписати рівняння (5) увигляді

$$\psi''+k_0^2n^2(x)\psi=0.$$

Розв'язок розпадається на три рівняння для трьох областей простору

$$\psi''+k_0^2\psi=0,\quad x<0,\quad U(x)=0,$$

$$\psi''+k_0^2n^2(x)\psi=0,\quad 0\le x\le l,\quad U(x)=U_m,$$

$$\psi''+k_0^2\psi=0,\quad x>l,\quad U(x)=0.$$

Розв'язки в цих областях можуть бути записані відразу:

$$\psi_1(x)=Ae^{ik_0x}+Be^{-ik_0x},$$

$$\psi_2(x)=Ce^{ik_0nx}+De^{-ik_0nx},$$

$$\psi_3(x)=Ee^{ik_0x}+Fe^{-ik_0x}.$$

де A, B, C, D, E і F – довільні сталі, значення яких встановлюють з умов неперервності хвильових функцій та їх похідних. У разі прямокутного бар'єру вони представляються наступними виразами

$$A = 1, F = 0,$$

$$B = \frac{2e^{ik_0 nl}(1+n)}{e^{-ik_0 nl}(1+n)^2 - e^{ik_0 nl}(1-n)^2},$$

$$C = \frac{2e^{-ik_0 nl}(n+1)}{e^{-ik_0 nl}(1+n)^2 - e^{ik_0 nl}(1-n)^2},$$

$$D = \frac{2e^{ik_0 nl}(n-1)}{e^{-ik_0 nl}(1+n)^2 - e^{ik_0 nl}(1-n)^2},$$

$$E = \frac{4ne^{-ik_0 l}}{e^{-ik_0 nl}(1+n)^2 - e^{ik_0 nl}(1-n)^2}.$$

Якщо енергія частинки *E* більша від висоти бар'єру *Um*, то показник заломлення *n* дійсний. У цьому випадку інтенсивність відбитої хвилі дорівнює

$$|B|^2 = \frac{4(1-n^2)^2 \sin^2(k_0 nl)}{(1+n)^4 + (1-n)^4 - 2(l-n^2)^2 \cos(2k_0 nl)},$$

а інтенсивність хвилі, що проходить

$$|E|^2 = \frac{16n^2}{(1+n)^4 + (1-n)^4 - 2(l-n^2)^2 \cos(2k_0 nl)}.$$

Дані вирази представляють амплітуди ймовірностей знаходження частинки у відповідних областях простору перед і за бар'єром. Відповідно показники відбиття і проходження знаходять наступним чином

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2},$$

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2}.$$

Якщо E < U_m, то показник n є уявною величиною. Тому його представляють у вигляді

$$n = i|n| = i\sqrt{\frac{U_m - E}{E}}.$$

Застосовуючи цей вираз для n, розраховують $|E|^2$. Тоді, беручи до уваги, що $e^{k_0|n|l} >> 1$, отримуємо коефіцієнт проходження

$$T = \frac{16|n|^2}{\left(1+|n|^2\right)^2} e^{-2k_0|n|l} = \frac{16|n|^2}{\left(1+|n|^2\right)^2} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_m - E)}l}.$$

При $E<Um$, на противагу висновкам класичної механіки, частинки проходять крізь бар'єр. Явище проходження крізь потенціальний бар'єр отримало назву тунельного ефекту або тунелювання. Зміни параметрів сигналів, обумовлені взаємодією хвильових пакетів з бар'єром, що не залежать від вибору положення джерела сигналу x_0 і визначаються лише хвильовим числом частинок, висотою і шириною бар'єру. Вирази, що описують зміщення центрів, зміну швидкості і розпливання хвильового пакету, можна використовувати для пояснення характеру залежності часу тунелювання частинок від ширини бар'єру.

За допомогою розглянутої задачі, можна переходити до розгляду більш складних потенціальних структур, що складаються з декількох потенціальних бар'єрів. У деяких з них, комбінація таких бар'єрів може привести до існування потенціальної ями в енергетичній діаграмі. Характерною особливістю в цьому випадку буде існування в ямі дискретного спектра енергій, а значить можливість існування стоячої хвилі [53,54].

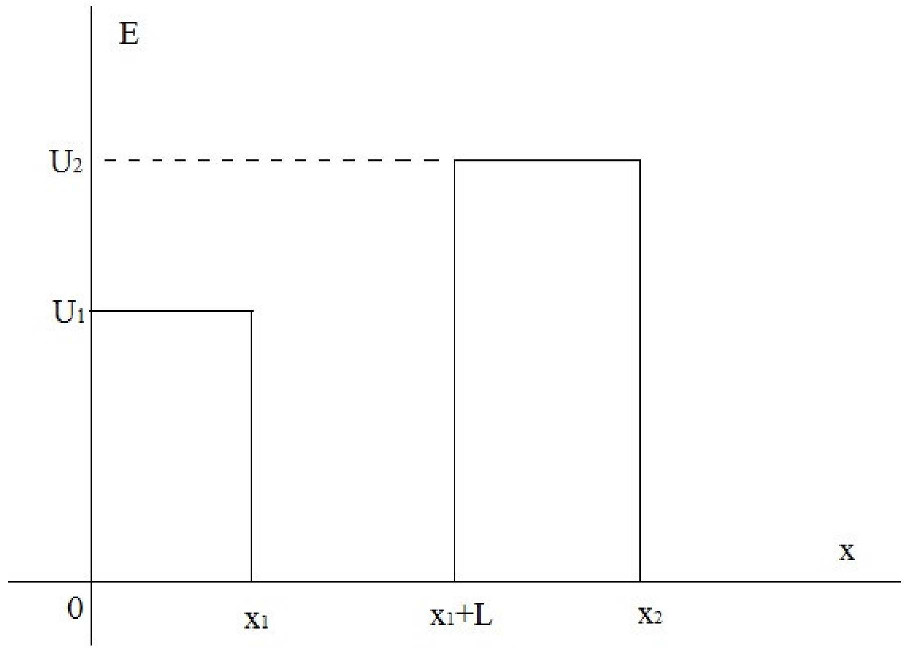


Рис. 1.2. Залежність потенціальної енергії двубар'єрної структури від просторової координати. Дана структура містить потенціальну яму ширини L, обмежену з обох боків потенціальними бар'єрами.

Розглянемо структуру, що складається з двох потенціальних бар'єрів кінцевої ширини, між якими розташована яма довжиною L. Припускаючи, що коефіцієнти відбиття і проходження для кожного з бар'єрів вже знайдені і дорівнюють відповідно R_1, R_2, T_1 і T_2. Тоді, зміна фази хвилі де Бройля дорівнює k_L, де k – хвильовий вектор частинки, що подається. Тоді в ході багатократного відбиття від стінок бар'єрів отримують амплітуди відбиття R

$$R = R_1 + \frac{D_1^2 R_2 e^{2ikL}}{1 - R_1 R_2 e^{2ikL}},$$

і проходження всієї системи D

$$D = D_1 + \frac{D_1 D_2 e^{2ikL}}{1 - R_1 R_2 e^{2ikL}}.$$

Знаючи амплітуди проходження та відбиття можливо знайти коефіцієнт проходження хвильового пакету, що описує частинку, яка проходить крізь бар'єр, у вигляді

$$|D|^2 = \frac{|D_1|^2 |D_2|^2}{1 + |R_1 R_2|^2 - 2|R_1 R_2|\cos(2kL + \varphi_1 + \varphi_2)}.$$

Де φ_1 і φ_2 – аргументи комплексних значень коефіцієнтів відбиття від першого і другого бар'єрів відповідно. З останнього виразу видно, що максимальне значення коефіцієнта проходження спостерігається за умови

$$\cos(2kL + \varphi_1 + \varphi_2) = 1,$$

що має місце при наступних значеннях імпульсу хвильового пакету

$$k_n = \frac{(2\pi n - (\varphi_1 + \varphi_2))}{2L}, \quad при \quad n \in Z.$$

Фазу φ_i можна подати у вигляді суми кінематичної фази φ_i, і динамічної – φ_r,. Фаза φ_i визначається положенням бар'єру на осі x, а фаза φ_r –

тільки властивостями бар'єру. Тоді для коефіцієнта проходження крізь бар'єр довільної форми отримуємо вираз

$$D \cong D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m\left(U\left(x\right) - E\right)} dx \right)$$

Це можна показати на добре відомому прикладі падіння частинки на нескінченно високу потенціальну стінку. Нехай частинка падає зліва на таку стінку, що розташовано в області $x \geq 0$. Тоді загальний розв'язок в області I перед бар'єром

$$\Psi = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$$

повинен перетворюватися на нуль при $x=0$, що приводить до $A_2=-A_1$. Але в загальному випадку $A_2=rA_1$, де r — амплітуда відбиття. Таким чином, для моделі, що розглядаємо матимемо, $r=-1$ або $r=e^{i\pi}$. Число π і є динамічна фаза. Якщо тепер початок потенціальної стінки знаходиться в точці $x=x_1$ (нехай, для визначеності $x_1>0$), тоді $A_2=-e^{2ikx}{}_1A_1$. Тепер $r=e^{i\pi}e^{2ikx}{}_1$ та фаза r є $\pi+2kx_1$, а величина $2kx_1$ — кінематична фаза. Її поява має простий фізичний зміст. Якщо початок бар'єру знаходиться в точці $x=x_1>0$, то у порівнянні із випадком $x_1=0$, падаючій на бар'єр хвилі потрібно пройти відстань x_1 до бар'єру, відбитися від нього, набуваючи фазу $\varphi_r = \pi$, і пройти відстань від бар'єра до точки $x = 0$. У сумі хвиля проходить додаткове відстань $2x_1$, іншими словами, набуває додаткової фазу $2kx_1$.

У загальному випадку бар'єру довільної форми ситуація буде аналогічною. Фаза амплітуди для r_1 дорівнюватиме

$$\varphi_r + 2kx_1, \quad \text{при цьому}, \quad \varphi_r \neq \pi.$$

Для двох бар'єрів, ліві межі яких визначаються точками x_1 та x_3, при чому $x_3= x_1+a+b$ (a — ширина одного бар'єра, b— відстань між бар'єрами), динамічні фази будуть однакові $\varphi_{r1} = \varphi_{r2} = \varphi_r$, а кінематичні фази будуть відрізнятися на величину $2k(x_3\text{-}x_1)$.

Аналогічний поділ фази на кінематичну і динамічну можна провести і для фази амплітуди проходження t. Але тепер кінематична фаза буде визначатися як $-ka$, де $a = x_2\text{-}x_1$ - ширина бар'єру. Фізично це означає наступне. Хвиля, що "пройшла" крізь бар'єр набуває динамічну фазу φ_t але, оскільки вона фактично не проходить крізь бар'єр (в області бар'єру розв’язки не мають вигляд e^{-ikx}), вона "втрачає" фазу $-ka$. Тобто, за бар'єром хвиля набуває фазовий множник $e^{i\,\varphi t\,-ka}$. Звідси випливає, що для двох однакових бар'єрів, розташованих в областях $x_2 \geq x \geq x_1$ і $x_4 \geq x \geq x_3$, збігаються і динамічні $\varphi_{t1} = \varphi_{t2} = \varphi_t$ і кінематичні фази, тобто $t_1 = t_2$.

Тоді в потенціальній ямі присутні квазістаціонарні стани звані резонансами, з рівнями енергії, що описуються виразом

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^{\;2}}{2m}.$$

На значення енергії E_n, в реальних бар'єрних структурах, сильно впливає наявність домішок, флуктуації товщини і складу бар'єрних шарів [50, 52]. При цьому зменшується резонансний струм частинок із заданою енергією. У зв'язку з цим при виготовленні резонансних тунельних приладів на основі напівпровідникових гетеростуктур висуваються підвищені вимоги до однорідності та ідентичності бар'єрних шарів.

При деяких значеннях коефіцієнтів відбиття і проходження потенціальних бар'єрів можна отримати коефіцієнт проходження, що дорівнюватиме одиниці. У цьому випадку при енергії налітаючої частинки, що співпадає з енергією резонансних рівнів потенціальної ями, двубар’єрна система стає повністю прозорою для налітаючої частки. Це явище отримало назву ефекту резонансного тунелювання [51, 52]. В результаті поширення хвилі, через інтерференцію хвиль де Бройля, зовні від системи бар'єрів залишаються лише падаюча і хвиля, що пройшла, при цьому відбита хвиля повністю гаситься.

Розглянутий вище прилад має назву двубар'єрного діода. Він складається з бар'єрів, розділених між собою потенціальною ямою (областю з низькою потенціальною енергією), в якій існує один або кілька дискретних рівнів. Характерна ширина бар'єрів і відстань між ними становить кілька нанометрів. Області ліворуч і праворуч від бар'єрів відіграють роль резервуарів електронної провідності, до яких примикають контакти.

Прилади, подібні до цього, успішно використовуються для створення лазерів [74,75]. Ці пристрої застосовуються в оптоволоконних лініях зв'язку. Для створення лазера, квантову яму під'єднують до двох контактів, крізь які електрони можуть безперервно надходити в робочу область. Через один з контактів електрони надходять в зону провідності. Після чого, здійснюючи стрибки із зони провідності у валентну зону, вони випромінюють кванти енергії. Далі, через валентну зону носії йдуть на другий контакт. Лазери на квантових ямах мають переваги порівняно зі звичайними напівпровідниковими лазерами. Ці прилади можна перебудовувати керуючи параметрами енергетичного спектра. При зменшенні розмірів ями мінімальні енергії електронів в зоні провідності і валентної зоні збільшуються, відповідно і частота, що генерується лазером зростає. Підбираючи товщину квантової ями, можна домогтися, щоб згасання хвилі в оптичній лінії зв'язку, в яку надходить випромінювання, було мінімальним. Слід зазначити, що останнім часом у багатьох світових лабораторіях ведеться робота зі створення лазерів на квантових точках, дослідженню тунелювання крізь які буде присвячено декілька розділів даної роботи.

1.3 Час затримки хвильового пакету в квантовій системі

Поняття часу затримки хвильового пакету в системі вперше було введено в роботі [33]. Воно являє собою різницю, між часом за який сигнал проходить задану відстань при своєму вільному поширенні і часом, за який ця ж відстань проходиться при наявності потенціального бар'єру.

Розглянемо рух хвильового пакету, що подається з лівого боку бар'єру і складається з декількох хвиль близьких за частотою. Падаючий пакет має наступну форму

$$\Psi_{in} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{m}{\hbar k}}\left(e^{i(kx-\omega t)} + e^{i(k+\Delta k)x-i(\omega+\Delta\omega)t}\right).$$

Центр цього хвильового пакету в момент часу t перебуває в точці з координатою x

$$t = \frac{\Delta k}{\Delta\omega}x.$$

Хвильовий пакет після тунелювання крізь бар'єр описується хвильової функцією Ψ_{tr}, яка набуває різницю фаз $\eta\ (\omega)$. Тобто, хвильовий пакет на правій стороні бар'єру має форму

$$\Psi_{in} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{m}{\hbar k}}\left(e^{i(kx-\omega t+\eta(\omega))} + e^{i(k+\Delta k)x-i(\omega+\Delta\omega)t+i\eta(\omega+\Delta\omega)}\right).$$

Оскільки $\Delta\omega$ досить мале, отримаємо

$$\eta(\omega+\Delta\omega)=\eta(\omega)+\frac{d\eta(\omega)}{d\omega}\Delta\omega.$$

Використовуючи останню рівність і вираз для хвильової функції пакету, що виходить, отримуємо наступне співвідношення

$$\psi_{tr}=\sqrt{\frac{m}{\hbar k}}\cos\left[\frac{1}{2}\left(\Delta kx-\Delta\omega t+\Delta\omega\frac{d\eta}{d\omega}\right)\right]\times$$
$$\times\exp\left[i\left(\Delta kx-\omega t+\eta(E)+\frac{i}{2}\left(\Delta kx-\Delta\omega t+\Delta\omega\frac{d\eta}{d\omega}\right)\right)\right].$$

Таким чином, хвиля, що виходить праворуч від бар'єру, має мінімум при x в момент часу t', де

$$t'=\left(\frac{\Delta k}{\Delta\omega}\right)x+\frac{d\eta}{d\omega}.$$

Таким чином час затримки можна знайти за формулою

$$\Delta t=\frac{d\eta}{d\omega}=\hbar\frac{d\eta}{dE}.$$

Для отримання цього результату використовувалося визначення хвильового пакету та квазікласичне наближення. Існуючі визначення часу тунелювання, отримані на основі рівняння Шрьодінгера і на основі рівняння Дірака, передбачають так званий ефект Хартмана – насичення часу тунелювання частинки з ростом ширини прямокутного бар'єру (аналогічний ефект, завдяки оптико-механічною аналогії, передбачається і для світлових пучків, що проходять крізь шаруваті середовища). В даний час питання про природу ефекту Хартмана [3,61–63] залишається дискусійним, а сам ефект трактується як парадокс, який потребує вирішення.

Розділ 2. Туннелювання хвильових пакетів крізь відкриті квантові системи з одним резонансним рівнем

Даний розділ роботи присвячено опису процесів тунелювання на основі модифікованого методу перевалу із застосуванням формалізму матриці розсіювання та безрозмірних змінних. Показано універсальність даного методу. Вказується, що при застосуванні методу перевалу, необхідно враховувати полюси матриці розсіювання та наводиться методика обрахунку.

Розглядається тунелювання пакетів гаусової форми та прямокутної форми у представленні функцій Хевісайда та суперпозиції функцій Гауса. Вибір форм розглянутих пакетів базується на можливості отримання точного розв’язку для випадку тунелювання хвильових пакетів кожного типу. Наводяться графічна та аналітична інтерпретація залежності форми хвильового пакету, що виходить з квантової системи, від параметрів початкового пакету та системи. Основна інформація, що стосується даного розділу представлена в роботах [3–5, 15, 34–48,78–80].

2.1 Модифікований метод перевалу

Тунелювання хвильових пакетів крізь квантові системи з резонансними рівнями раніше вважалося проблемою, що не має загального розв’язку. Її розв’язок пропонувався або в одиничних окремих випадках, для певних систем і для визначеної форми пакетів, або методом комп’ютерної симуляції, який не дозволяє проводити аналіз та детальне дослідження особливостей цього процесу. Отже однією з вкрай важливих задач є побудова методу, що дозволить в загальному випадку аналітично розв’язувати задачі, пов’язані з процесом тунелювання. Нижче в даній роботі ми наводимо такий метод із прикладами його практичного застосування.

Сигнал, що подається на вхід відкритої одновимірної квантової системи, представимо у вигляді відповідної хвильової функції Ψ, визначеної в імпульсному просторі. Характеристичними параметрами хвильової функції є координата x, час t, імпульс k, розташування k_0 центру хвильового пакету в імпульсному просторі. Параметрами, які задають систему – ширина резонансних рівнів Γ, їх кількість, а також розташування k_j в імпульсному просторі полюсів S-матриці розсіювання.

Нехай a задає ширину хвильового пакету, t_a – часову тривалість пакету. Після виходу з квантової системи хвильова функція Ψ складатиметься з двох доданків: Ψ_{res} – резонансна частина, що залежить від параметрів системи й хвильового пакету, та Ψ_{bg} – фонова частина, яка не залежить від резонансних рівнів системи. S-матриця визначена тільки в разі динамічного процесу розсіювання,

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

і задає зв'язок хвильових пакетів, що входять та виходять із системи (1). Знаючи матрицю розсіювання, можна визначити форму пакету, який виходить за формою вхідного.

Представлення пакету довільної форми, в будь-який момент часу після виходу з квантової системи (див. [39]), у формалізмі S-матриці, має вигляд

$$\Psi(x > 0, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Psi_0(k) S(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar}{2m}k^2 t\right)} dk,$$

де $\Psi_0(k)$ – Фур'є-образ функції, яка задає форму сигналу, S – матриця розсіювання системи. Інтегрування ведеться за всіма значеннями в просторі імпульсів. В імпульсному просторі представлення будь-якої розсіючої квантової системи за допомогою S-матриці має вигляд (див. [39–43,56])

$$S(k) = \sum_{j=1}^{N} \left[a_j \frac{i\Gamma_j}{2(k - k_j) + i\Gamma_j} + b_j \right],$$

$$k_j = \sqrt{\frac{2mE_j}{\hbar^2}},$$

де k_j – імпульс, Γ_j – ширина j-го резонансу, параметри a_j та b_j визначаються внутрішніми властивостями системи й пов'язані з S_{res} (що визначає резонансну частину розсіювання) та S_{bg} (що визначає фонову частину розсіювання) наступними співвідношеннями (см. [39])

$$a_j = \frac{2m}{\hbar^2\left(2k_j - i\Gamma_j\right)} S^{res},$$

$$b_j = S^{bg} - \frac{i a_j \Gamma_j}{4k_j - 2i\Gamma_j}.$$

Всі зазначені вище вирази відповідають випадку системи, що містить N резонансних рівнів.

В основі підходу лежить модифікований метод перевалу. Якщо ми отримаємо кілька точок перевалу, то результатом буде суперпозиція результатів для кожної з них. Групову швидкість вхідного пакету позначимо $v_0 = k_0/m$, де k_0 – імпульс центру мас. Будемо використовувати наступні безрозмірні змінні:

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

де t_a – 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 наступне – всі характеристики проходження будуть вимірюватися в термінах падаючого хвильового пакету. Параметрами координати і часу стають q і τ відповідно. Ширина падаючого імпульсу стала одиничною. Подання квантової системи в термінах, що характеризують імпульс, дає достатнє число параметрів для опису процесу проходження. Введемо позначення, прийняті в роботі [41], які дозволять спростити вирази і зроблять більш наочними подальші кроки обчислень

$$\beta = \frac{1 + i\tau}{2};\quad q_{0j} = l_0 - l_j + i\rho_j;\quad q = q' - l_0\tau.$$

Враховуючи, що $t_a = ma^2/k$, отримаємо в цих позначеннях хвильовий пакет, що вийшов з системи у вигляді

$$\Psi(x>0,t)=\frac{1}{a\sqrt{2\pi}}e^{il_0\left(q-\frac{1}{2}l_0\tau\right)}\times$$
$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_0(s)S(s+l_0)e^{isq'-\left(\beta-\frac{1}{2}\right)s^2}ds,$$

де

$$S(l)=\sum_{j=1}^{N}\left[a_j\frac{i\rho_j}{l-l_j+i\rho_j}+b_j\right],$$

Звідси очевидним чином випливає, що параметром асимптотичного розкладу є τ, оскільки саме ним визначається осциляторна поведінка експоненти в підінтегральному виразі.

Представлятимемо *S (l)* у вигляді експоненти

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

Тоді інтегральне рівняння прийматиме вигляд

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

де фазою експоненти буде

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

Для аналітичного розв’язку задачі скористаємося модифікованим методом перевалу (див. [39]). Параметром, що дозволяє застосовувати даний метод, буде τ, тобто розглянутий момент часу, коли хвильовий пакет вийшов з системи, будемо вважати у багато разів більшим за тривалість самого хвильового пакету t_a, що є необхідною умовою існування резонансу. Обчислення точки перевалу визначається з умови стаціонарності

$$\frac{d\Phi(s)}{ds} = 0.$$

Зазвичай точка перевалу обчислюється без урахування члена ln S (l) (див. [15,83]). 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 Φ (s) і відповідно в рівняння. Тому всі особливості амплітуди як аналітичної функції будуть знайдені з цього рівняння.

У цьому і полягає головна перевага запропонованого методу. Оскільки властивості аналітичної функції визначаються її особливостями, то асимптотичний розклад, визначає поведінку амплітуди при великих значеннях параметра τ, фактично виявляється придатним для значень змінних аж до найближчої особливої точки, яка може знаходитися навіть при малих значеннях параметра, що визначає асимптотику. Ця властивість добре відома в додатках асимптотичних розкладань. Таким чином, в нашому випадку можна очікувати близькості асимптотичного і точного розв’язків при однакових значеннях τ.

Отримуємо наступне представлення для резонансної (res) і фонової (bg) частин:

$$\Psi(q>0,\tau)=\sum_j \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} e^{il_0\left[q-\frac{l_0\tau}{2}\right]} \int_{-\infty}^{\infty} (f_j^{res}(s) e^{g_j^{res}(s)} + \\ + f_j^{bg}(s) e^{g_j^{bgs}(s)}) ds \tag{2.1}$$

де фази резонансної та фонової частин дорівнюють

$$g_j^{res}(s) = isq' - \left(\beta + \frac{1}{2}\right)s^2 - \ln(s - q_{0j}) + \ln(\Psi_0(s)),$$

$$g_j^{bg}(s) = isq' - \left(\beta + \frac{1}{2}\right)s^2 + \ln(\Psi_0(s)),$$

а амплітуди повязані з елементами матриці розсіювання через наступні співвідношення

$$f_j^{res}(s) = i\rho_j a_j; \quad f_j^{bg}(s) = b_j.$$

Знайдемо корені рівняння $g'(s) = 0$. Ті з них, які задовольняють умовам стаціонарності

$$Im\, g(s) = const, \quad Re\, g(s) < Re\, g(s_k),$$

де s_k – k-й корінь рівняння $g'(s) = 0$, які і будуть точками перевалу. Відповідно до цих умов ми повинні змінити контур інтегрування таким чином, щоб шлях інтегрування проходив в напрямку найбільш швидкої зміни $Re\ g(s)$. Оскільки функція $g(s)$ аналітична, то цей напрям співпадає з напрямом лінії $Im\ g(s)=const$. У результаті в околі точки стаціонарності амплітуда прийме вигляд

$$\Psi(q>0,\tau)\approx\sum_{jk}\frac{1}{a}e^{il_0\left[q-\frac{l_0\tau}{2}\right]}\left(e^{g_j^{res}\left(x_k^s\right)}\sqrt{-\frac{1}{e^{g_j^{res''}\left(x_k^s\right)}}}f_j^{res}\left(x_k^s\right)\right)+$$

$$+\sum_{jk}\frac{1}{a}e^{il_0\left[q-\frac{l_0\tau}{2}\right]}\left(e^{g_j^{bgs}\left(x_k^s\right)}\sqrt{-\frac{1}{e^{g_j^{bg''}\left(x_k^s\right)}}}f_j^{bg}\left(x_k^s\right)\right).$$

Індекс j пробігає всі резонансні стани, а k - всі точки перевалу. Ця формула дає асимптотичне представлення хвильової функції пакету довільної форми, що проходить крізь резонансну квантову систему.

Застосування підходу на основі модифікованого методу перевалу до розв'язку класичних хвильових рівнянь для електромагнітної хвилі, є досить перспективним. Причиною цього є схожість методики обчислень цієї проблеми та задачі тунелювання хвильових пакетів крізь квантові системи.

Розвинений метод є універсальним і дозволяє вивчати процес тунелювання хвильових пакетів різної форми крізь довільні квантові системи з резонансними рівнями [39–48]. Слід зазначити, що в сучасних світових лабораторіях, технічна база дозволяє отримувати використовувану для розрахунків матрицю розсіювання шляхом лабораторних вимірювань в автоматизованому режимі. У зв'язку з цим відкривається шлях для дослідження різноманітних систем та хвильових пакетів, об'єднуючи безпосередньо експериментальні результати з аналітичними обчисленнями.

2.2 Проходження хвильового пакету гаусової форми

Опис процесу тунелювання вимагає врахування численних квантових і граничних ефектів, пов'язаних з суперпозицією падаючої і відбитої хвиль. Ці явища спостерігаються при проходженні сигналів крізь двубар'єрні діоди, транзистори квантового тунелювання і відкриті гетероструктури. Подібні системи широко використовуються в сучасній мікро– та наноелектроніці. Даній проблемі присвячено величезну кількість публікацій (див, наприклад, [1–9] і посилання в них). Основними цілями тут є опис процесу тунелювання і часу затримки пакету всередині системи. Через складність будови квантових систем і різноманітності форм сигналів що подаються на вхід, більшість досліджень проводилося для одного виду сигналів і вузького класу систем із типовою геометрією. Протягом довгого часу не було розроблено загального аналітичного підходу. Однак, великий інтерес викликає саме це, оскільки час затримки та інші характеристики тунелювання можуть бути визначені, як раз в аналітичному дослідженні. Останнім часом, у ряді робіт [34-37], загальний розв’язок задачі розсіювання (в аналітичному вигляді) було отримано для пакету гаусової форми. Амплітуда пакету, що виходить із системи для випадку тунелювання прямокутного сигналу, була описана за допомогою спеціальних функцій помилок *erfc (x)*. При такому підході, квантова система представлена за допомогою S-матриці резонансних рівнів енергії E_n і відповідно їх ширини Γ_n. Опис геометричних характеристик системи відбувається в термінах характеристик пакета, що подається (його ширини). Як наслідок, всі імпульси мають одиничну ширину, що дозволяє узагальнити даний підхід і поширити його на сигнали довільної ширини. Потім, для обчислення амплітуди переходу, використовується узагальнений метод точки перевалу. Після цього, можна повернутися до вихідних параметрів задачі. Це відкриває можливість для досліджень пакетів різних форм, використовуючи принцип суперпозиції, що і буде показано далі.

Досліджуватимемо тунелювання прямокутного пакету крізь систему з одним резонансним рівнем, що має практичний інтерес. Ми представляємо падаючий хвильовий пакет як суперпозицію трьох сигналів гаусової форми з близькими імпульсами і шириною. Амплітуда початкового сигналу визначається суперпозицією кожного з них. Ми розрахуємо основні характеристики амплітуди пакету, що виходить з системи, а також часу затримки. Отримані результати порівняємо з результатами для тунелювання хвильового пакету, що описується однією гаусіаною. Порівняння показує, що подаваний прямокутний хвильовий пакет набуватиме характеристик, які є більш привабливими для різних практичних застосувань.

Застосуємо розроблений метод до задачі про проходження сигналу гаусової форми крізь систему з одним резонансним рівнем. Представимо хвильову функцію початкового пакету як

$$\psi(S)=\psi_0 \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right).$$

де $\psi_0=a^{-1/2}\pi^{-1/4}$.

Отримаємо точку перевалу

$$S_1=\frac{1}{2}\left(q_0+\frac{iq'}{2\beta}\right)+\frac{1}{2}\left[\left(q_0-\frac{iq'}{2\beta}\right)^2-\frac{2}{\beta}\right]^{1/2}$$

Тоді аргумент експоненти представляє собою вираз

$$g(s)=isq'-\beta s^2+\ln(\psi_0)-\ln(s-q_0).$$

Звідси, хвильова функція пакету, що залишає систему, буде мати вигляд

$$\psi = i\rho_j a_j e^{g(s_1)}\sqrt{-\frac{1}{g''(s_1)}}.$$

Для того, щоб знайти час затримки сигналу в системі, розглянемо отримані результати за умови τ → ∞, тоді

$$S_1 = i\frac{q-l_0\tau}{1+i\tau}+\frac{1}{l_i-l_0+\rho_i\tau-i(q+\rho_i-l_i\tau)}+O\left(\beta^{-2}\right).$$

Для пакету, що виходить, матимемо

$$\psi^{res}(q,\tau)=\frac{i\rho_j a_j}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(q-l_0\tau)^2}{1+\tau^2}+iArg(\psi)\right)\frac{\left(1+\tau^2\right)^{1/4}}{\left[(q+\rho_i-l_i\tau)^2+(\rho_i\tau+l_i-l_0)^2\right]^{1/2}},$$

де аргумент описується наступним виразом

$$Arg(\psi)=\frac{1}{2}arctg(\tau)+\frac{(q-l_0\tau)^2\tau}{2(1+\tau^2)}-arctg\left(\frac{\rho_i\tau+l_i-l_0}{q+\rho_i-l_i\tau}\right).$$

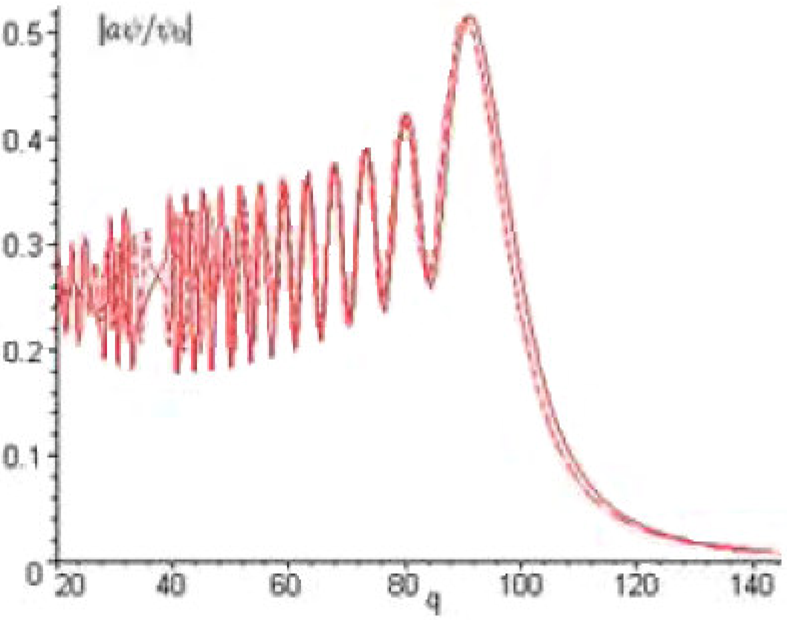


Рис. 2.1. Графіки функцій $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) и $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100,\ a_1=1,\ l_0=l_1=1,\ \rho=0.04$. За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового, за горизонтальною віссю – безрозмірна координата, після виходу пакету з системи.

На Рис.2.1 і 2.2 представлена залежність амплітуди вихідного хвильового пакету, що представляє собою один сигнал гаусової форми, від координати, для визначених характеристик системи та імпульсу. Пунктирною лінією представлено розв'язок, отриманий за допомогою модифікованого методу перевалу, а суцільною – результати точного інтегрування.

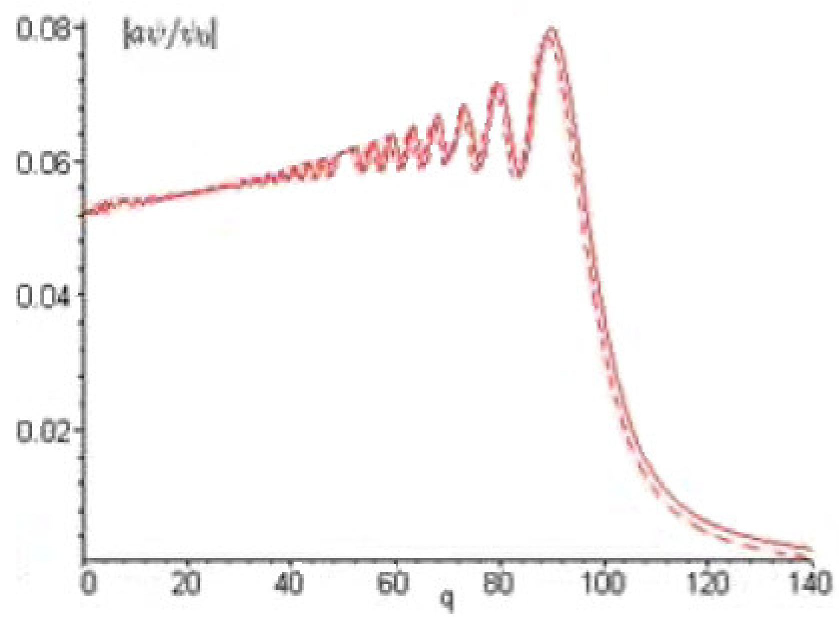


Рис. 2.2. Графіки функцій, що отримано узагальненим методом точки перевалу $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) та результатів точного інтегрування $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100$, $a_1=1$, $l_0=l_1=1$, $\rho=0.007$. За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового, за горизонтальною віссю – безрозмірна координата, після виходу пакету з системи.

Як можна побачити метод показав високий ступінь співпадіння результатів з результатами точного розвязку при розрахунку. Для сигналів гаусової форми і їх суперпозиції точний розв'язок знайти досить просто. Якщо ж імпульс, що подається, описується не гаусовими пакетами, то застосування методу перевалу у багато разів спрощує, а головне прискорює отримання розв'язку.

2.3 Проходження хвильового пакету прямокутної форми

Подання сигналу прямокутної форми за допомогою функцій Хевісайда

Для розділення сигналів можуть використовуватися не тільки частота і час, а й форма сигналів. Поділ каналів прийому за формою поки не знайшов такого широкого використання, як частотний і часовий. Однак, його справжнє застосування і перспективи найбільшою мірою пов'язані з множинним доступом в мобільних та супутникових системах. В мобільному зв'язку кодове розділення розглядається як один з основних видів забезпечення множинного доступу, в плані реалізації концепції розвитку систем мобільного зв'язку. Тому практичний інтерес представляє, також, дослідження поведінки сигналів різних форм. Одним із найбільш часто використовуваних і простіших при генеруванні в лабораторних умовах, є сигнал прямокутної форми.

Застосуємо розвинений метод для дослідження проходження пакету прямокутної форми крізь квазіодновимірну квантову систему з одним резонансним рівнем. Пакет представимо за допомогою двох функцій Хевісайда,

$$\Psi(x) = \Theta(x) - \Theta(x-a),$$

де x – просторова координата, з різницею a – в аргументі, що відповідає ширині хвильового пакету.

Використовуємо відомий Фур'є-образ функції Хевісайда,

$$\Theta(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{1}{ik}+\pi\delta(k)\right)e^{ikx}dk.$$

У цій формулі x просторова координата, а κ – відповідне значення в просторі імпульсів. Сигнал що входить в систему буде представлятися в наступному вигляді:

$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\left(1-e^{-ika}\right)\left(\frac{1}{ik}+\pi\delta(k)\right)S(k)e^{ik\left(x-\hbar\frac{kt}{2m}\right)}$$

Тут інтегрування здійснюється за всіма значеннями імпульсного простору, m відповідає ефективній масі частинки, x та t відповідно просторова та часова координати, a – ширина хвильового пакету.

При переході до безрозмірних змінних, отримаємо

$$\Psi(q>0,\tau)=\frac{1}{a\sqrt{2\pi}}e^{il_0\left(q-\frac{1}{2}l_0\tau\right)}\times$$
$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\left(1-e^{-is}\right)\left(\frac{a}{is}+\pi\delta\left(\frac{s}{a}\right)\right)e^{s\left(iq'-\left(\beta-\frac{1}{2}\right)s\right)}ds$$

Тоді аргументи експоненти приймуть вигляд

$$g_j^{res}(s)=isq'-\left(\beta-\frac{1}{2}\right)s^2-\ln\left(s-q_{0j}\right)+\ln\left(\left(1-e^{-is}\right)\left(\pi\delta\left(\frac{s}{a}\right)+\frac{a}{is}\right)\right),$$

та

$$g_j^{bg}(s) = isq' - \left(\beta - \frac{1}{2}\right)s^2 + \ln\left(\left(1 - e^{-is}\right)\left(\pi\delta\left(\frac{s}{a}\right) + \frac{a}{is}\right)\right).$$

Оскільки цей вираз включає в себе складові, що містять в знаменнику s, то отримуємо особливу точку s = 0. Однак, ця особлива точка не використовується в якості точки перевалу, оскільки при даному значенні змінної не спостерігається розсіювання. Врахуємо, що при значеннях s, відмінних від нуля, функція $\delta(s/a)$ обертається в нуль,

$$g_j^{res}(s) = isq' - \left(\beta - \frac{1}{2}\right)s^2 - \ln\left(s - q_{0j}\right) + \ln\left(\left(1 - e^{-is}\right)\frac{a}{is}\right).$$

Скористаємося розкладанням експоненти в ряд Тейлора і виділимо перші три члени розкладання, отримаємо наступний вираз

$$g_j^{res}(s) = isq' - \left(\beta - \frac{1}{2}\right)s^2 - \ln\left(s - q_{0j}\right) + \ln\left(a - \frac{ais}{2}\right).$$

Тоді, отримаємо такий вираз для похідної

$$g_j^{res\,\prime}(s) = iq' - (2\beta - 1)s - \frac{1}{s - q_{0j}} - \frac{ia}{a(2 - is)}.$$

Знайдемо корені рівняння $g_j^{res}{}'(s)=0$. Ті з розв'язків, які задовольняють умовам стаціонарності, і будуть точками перевалу. Отримаємо три кореня, два з яких задовольняють даній вимозі. Через складність співвідношень між параметрами задачі, не представляється можливим, зважаючи на громіздкість, приводити аналітичний вигляд виразів для точок стаціонарності $s_1=s_1(q', q_{0j}, \beta)$ та $s_2=s_2(q', q_{0j}, \beta)$ – кожен з коренів займає кілька сторінок і просто знаходиться за допомогою стандартних програм математичних пакетів [64,65]. Надалі замість цього ми представимо необхідні графіки розрахунків процесу тунелювання.

Для хвильового пакету, що виходить, отримуємо такий вираз

$$\Psi_{jsp}^{res}(q,\tau) = i\rho_j a_j \left[e^{g^{res}(s_1)} \sqrt{-\frac{1}{g^{res''}(s_1)}} + e^{g^{res}(s_2)} \sqrt{-\frac{1}{g^{res''}(s_2)}} \right],$$

який враховує суперпозицію розв'язків від двох точок перевалу. Підставивши сюди знайдені значення $s_1=s_1(q', q_{0j}, \beta)$ и $s_2=s_2(q', q_{0j}, \beta)$, побудуємо графік функції $|\psi(q)|$, що дасть нам асимптотичний розв'язок, зображений на малюнках пунктиром.

Точним розв'язком буде

$$\Psi^{ex} = \frac{ia}{q_{0j}}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left[\exp\left[iq'q_{oj} - q_{0j}^2\left(\beta-\frac{1}{2}\right)\right]\mathrm{erfc}\left(\frac{q'}{2\sqrt{\beta-1/2}} - \right.\right.$$

$$\left.\left. - iq_{0j}\sqrt{\beta-\frac{1}{2}}\right) - \mathrm{erfc}\left(\frac{q'}{2\sqrt{\beta-1/2}}\right)\right] -$$

$$-\frac{ia}{q_{0j}}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left[\mathrm{erfc}\left(\frac{q'-1}{2\sqrt{\beta-1/2}}\right) + \mathrm{erfc}\left(\frac{q'}{2\sqrt{\beta-1/2}}\right)\right] -$$

$$-\frac{ia}{q_{0j}}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left[\mathrm{erfc}\left(\frac{q'-1}{2\sqrt{\beta-1/2}}\right) + \right.$$

$$\left. + erfc\left(\frac{q'-1}{2\sqrt{\beta-1/2}} - iq_{0j}\sqrt{\beta-\frac{1}{2}}\right)\exp\left[i(q'-1)q_{0j} - q_{0j}^2\left(\beta-\frac{1}{2}\right)\right]\right].$$

З останнього виразу видно, що, як і у випадку сигналу гаусової форми, на виході з системи отримуємо сигнал, форма якого описується *erfc*-функцією (стандартною функцією помилки [88]). Легко бачити, що це відбувається тому, що вхідний сигнал не залежить від власних параметрів системи, що визначають форму вихідного сигналу. Отримуємо, що незалежно від форми вхідного сигналу пакет, що виходить визначається суперпозицією *erfc*-функцій різних аргументів. Значення ж аргументів, визначаються формою вхідного пакету. Розглянемо координатну залежність амплітуди прямокутного пакету, що проходить крізь систему, розраховану для зазначених значень параметрів системи і імпульсу. На Рис.2.3–2.8 показано як змінюється форма прямокутного пакету при проходженні резонансної системи з заданими параметрами. Зміна τ не призводить до зміни зовнішньої форми вихідного сигналу, що проілюстровано на Рис.2.7–2.9, відбувається тільки зсув графіка по осі q. Цей результат можна назвати очікуваним, оскільки після виходу з квантової системи ніяких змін форми вихідного сигналу не відбувається. Початкова точка q = 0 визначає зовнішню межу системи. Це ще раз показує, що амплітуда хвильової функції залежить тільки від параметрів системи і вхідного пакета.

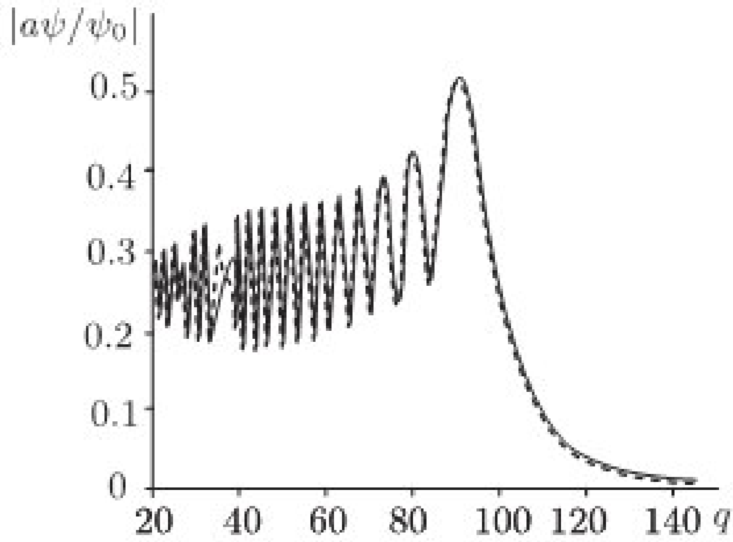


Рис. 2.3. Графіки функцій, що отримано узагальненим методом точки перевалу $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) та результатів точного інтегрування $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100,\ a_1=1,\ l_0=l_1=1,\ \rho=0.004$. За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового, за горизонтальною віссю – безрозмірна координата, після виходу пакету з системи.

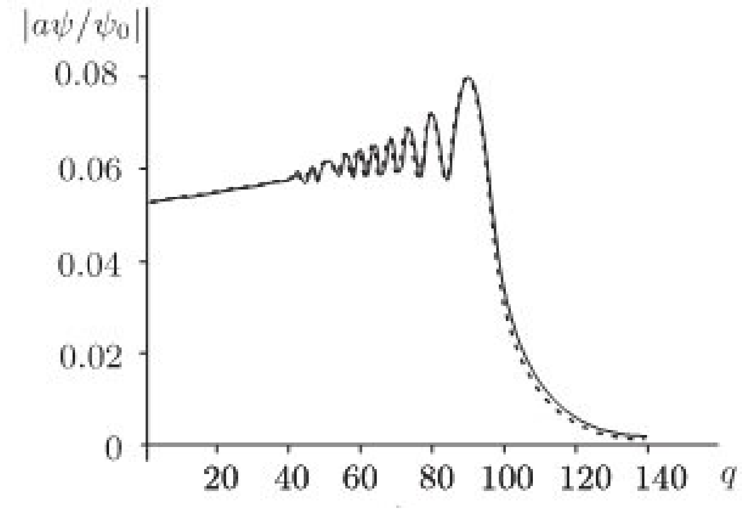


Рис. 2.4. Графіки функцій, що отримано узагальненим методом точки перевалу $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) та результатів точного інтегрування $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100$, $a_1=1$, $l_0=l_1=1$, $\rho=0.007$. За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового, за горизонтальною віссю – безрозмірна координата, після виходу пакету з системи.

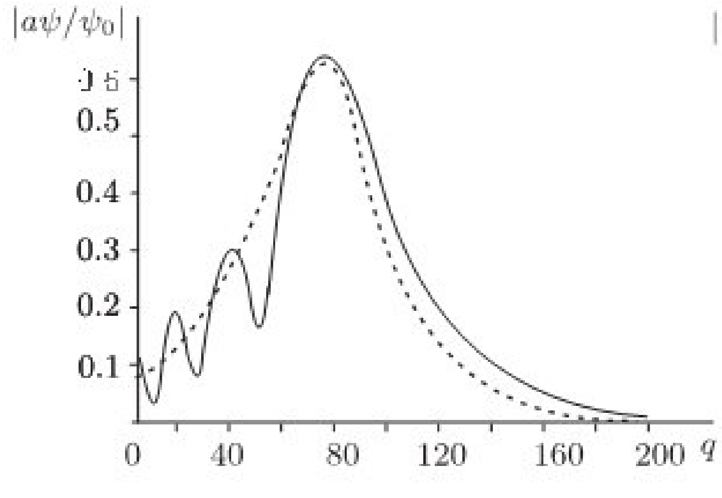


Рис.2.5. Графіки функцій, що отримано узагальненим методом точки перевалу для головного члена ряду при тунелюванні пакету гаусової форми $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) та результатів точного інтегрування $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100$, $a_1=1$, $l_0=l_1=1$, $\rho=0.09$. За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового,

за горизонтальною віссю безрозмірна – координата, після виходу пакету з системи.

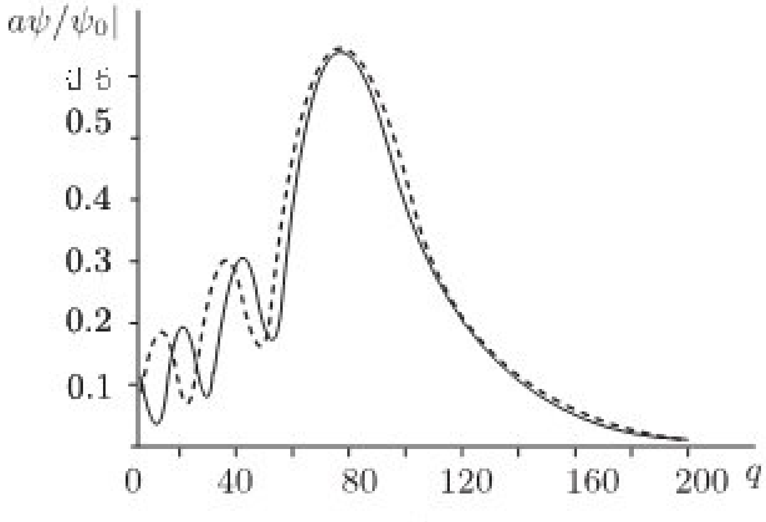


Рис.2.6 Графіки функцій, що отримано узагальненим методом точки перевалу для розширеного розкладання ряду при тунелюванні пакету гаусової форми $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) та результатів точного інтегрування $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100$, $a_1=1$, $l_0=l_1=1$, $\rho=0.09$. За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового, за горизонтальною віссю – безрозмірна координата, після виходу пакету з системи.

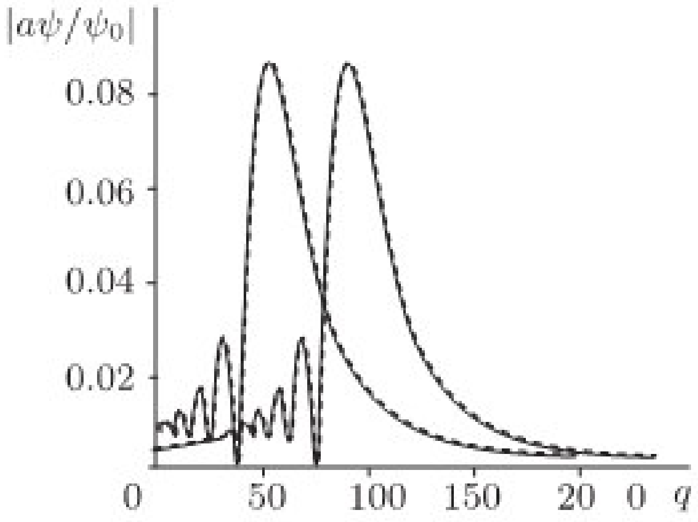


Рис.2.7. Графіки функцій, що отримано узагальненим методом точки перевалу $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) та результатів точного інтегрування $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100$ (крива 1, що зліва) та для $\tau=60$ (крива 2, що справа) $a_1=1,$ $l_0=l_1=1,$ $\rho=0.1.$ За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового, за горизонтальною віссю – безрозмірна координата, після виходу пакету з системи.

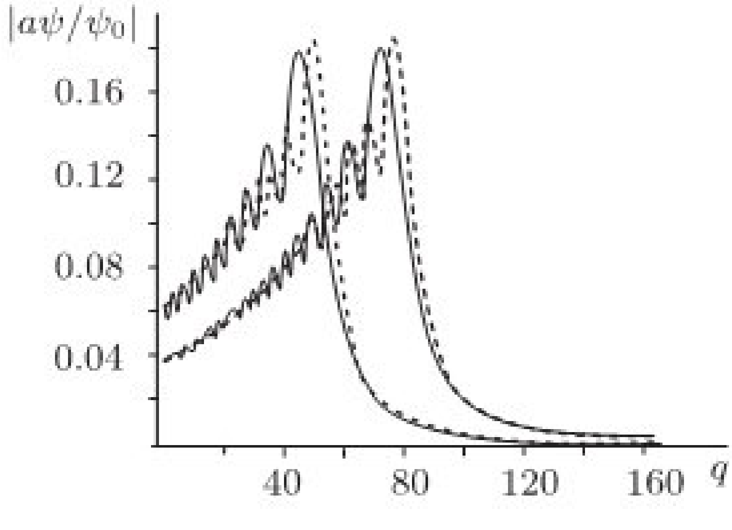


Рис.2.8. Графіки функцій, що отримано узагальненим методом точки перевалу $|\psi_p^{sp}(q)|$ (пунктирна лінія) та результатів точного інтегрування $|\psi_r^{ex}(q)|$ (суцільна лінія) для $\tau=100$ (крива 1, що зліва) та для $\tau=60$ (крива 2,

що справа) $a_1=1$, $l_0=l_1=1$, $\rho=0.007$. За вертикальною віссю відкладено амплітуду вихідного сигналу в масштабі амплітуди початкового, за горизонтальною віссю – безрозмірна координата, після виходу пакету з системи.

З Рис.2.3 та 2.4 випливає, що розглянутий метод при невеликих значеннях ρ (ρ <0.09), дає результати, які добре узгоджуються з результатами точного розв'язку. Але при великих значеннях ρ відбувається втрата малих гармонік – Рис.2.5. Скористаємося розкладанням до другого члена асимптотичного ряду, явний вигляд якого представлений виразом [66, 67]

$$\Psi_{jsp}^{res}(q,\tau)=i\rho_j a_j\left[e^{g^{res}(s_1)}\sqrt{-\frac{1}{g^{res''}(s_1)}}+e^{g^{res}(s_2)}\sqrt{-\frac{1}{g^{res''}(s_2)}}\right.$$

$$+\frac{e^{g^{res}(s_1)}}{6\sqrt{2\pi\left(g^{res''}(s_1)\right)^7}}\left[12g^{res''}(s_1)\left(f^{res''}(s_1)g^{res''}(s_1)-f^{res'}(s_1)g^{res(3)}(s_1)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+f^{res}(s_1)\left(5\left(g^{res(3)}(s_1)\right)^2-3g^{res''}(s_1)g^{4res}(s_1)\right)\right)\right]+\frac{e^{g^{res}(s_2)}}{6\sqrt{2\pi\left(g^{res''}(s_2)\right)^7}}\times$$

$$\times\left[12g^{res''}(s_2)\left(f^{res''}(s_2)g^{res''}(s_2)-f^{res'}(s_2)g^{res(3)}(s_2)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+f^{res}(s_2)\left(5\left(g^{res(3)}(s_2)\right)^2-3g^{res''}(s_2)g^{res(4)}(s_2)\right)\right)\right]$$

У роботі розглядалося проходження хвильового пакету прямокутної форми крізь резонансну квантову систему на основі S-матричного формалізму і методу перевалу. Були отримані результати, представлені на Рис.2.5. При порівнянні результатів зображених на Рис.2.6 та Рис.2.5, можна бачити, що наочна втрата малих гармонік, хоча головний пік співпадає за локалізацією та амплітудою. Як і у випадку з пакетом прямокутної форми при досить великих значеннях ρ відбувається втрата гармонік Рис.2.6. Використовуючи розкладання до другого члена асимптотичного ряду, отримаємо результат, зображений на Рис.2.6. Він добре узгоджується с точним виразом. Очевидно, що у разі втрати малих гармонік, облік нових членів може поліпшити цю відповідність.

Таким чином, досліджено проходження хвильового пакету прямокутної форми крізь квантову систему з одним резонансним рівнем. Знайдена форма пакету, що проходить крізь квантову систему з резонансними рівнями. Показано збіг результатів, отриманих точним чисельним і асимптотичним методами. При малих значеннях параметра затухання ρ, використовувані методи дають досить точну відповідність результатів навіть при обліку першого члена асимптотичного розкладу. Фактично це означає, що виділені всі аналітичні особливості амплітуди проходження. При великих значеннях ρ відбувалася втрата малих гармонік на тлі збереження головного піку. Втрата гармонік в цьому випадку усувається врахуванням більшої кількості членів асимптотичного ряду. Таким способом були уточнені результати задачі про проходження пакетів гаусової та прямокутної форм крізь квантову систему з резонансними рівнями. Як показало дослідження, при будь-якій конфігурації сигналу, що подається, з квантової системи виходить сигнал, форма якого представлена у вигляді суперпозиції додаткових функцій помилок.

Використовуваний метод дозволяє знайти і визначити всі змінні, необхідні для опису квазі-одновимірних квантових систем з резонансними рівнями. Його застосування до розв’язку задачі про розсіяння хвильового пакету, дає максимально формалізований аналітичний розв’язок. Таким чином, показана доцільність використання підходу заснованого на формалізмі S-матриці і методі перевалу, що відкриває можливість для розв’язку широкого класу задач, пов'язаних з процесом розсіювання в квазі-одновимірних системах. Ключовою ідеєю даного підходу є використання безрозмірних змінних і врахування полюсів S-матриці при обчисленні точок стаціонарності. При розгляді систем, що містять два і більше резонансних рівнів, розв’язок представляється з урахуванням суперпозиції результатів від кожного з них. Отримані в даній роботі результати можуть використовуватися надалі для розв’язку широкого класу задач, пов'язаних з проходженням хвильових пакетів крізь квантові системи з резонансними рівнями. Зокрема, однією з таких задач є визначення часу затримки сигналу в системі. Через внутрішні особливості систем з резонансними рівнями без точних розрахунків, визначити, як довго сигнал буде знаходитися в системі, досить важко. Використовуючи запропонований метод, зокрема, стало можливим розраховувати час затримки сигналу різних конфігурацій, при проходженні таких систем як двубар'єрні діоди і транзистори квантового тунелювання.

Представлення хвильового пакету прямокутної форми як суперпозиції гаусових пакетів

Тунелювання прямокутних хвильових пакетів представляє інтерес тому, що імпульси такого типу можуть бути легко отримані в лабораторних умовах. Для зв'язку хвильових станів перед і після розсіювання широко використовується S-матричний формалізм теорії розсіювання. S-матричні елементи можуть бути обчислені за допомогою різних методів. Наприклад, розширення амплітуди розсіяння в теорії збурень і дослідження його загальних властивостей. Згідно з загальною методикою [39–43,56], введемо безрозмірні змінні для опису початкового хвильового пакету і квантової системи. S-матриця, задається у вигляді суперпозиції резонансних рівнів k_j у вигляді

$$\frac{a_j}{k - k_j + \frac{i\Gamma_j}{2}} .$$

Тут, величина

$$k_j = \frac{\sqrt{2mE_j}}{\hbar},$$

пов'язана з енергіями рівнів та їх відповідною шириною. Тоді вихідний хвильовий пакет пов'язано з початковим наступним чином

$$\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Psi_0(k) S(k) e^{(ikx - \frac{i\hbar}{4m\pi} k^2 t)} dk .$$

Як видно на Рис. 2.9, суперпозиція гаусових пакетів дозволяє формувати з них прямокутний пакет. Чим більша кількість гаусових пакетів буде використано тим більше сигнал буде приймати риси прямокутного. Варіюючи їх число, можна задавати різну ширину початкового пакету.

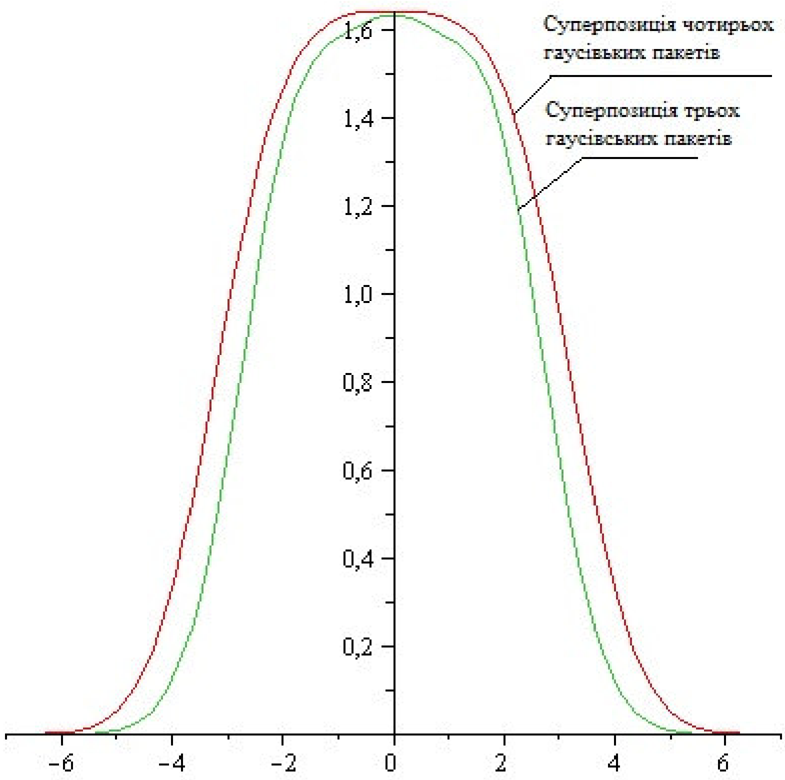


Рис.2.9. Суперпозиція трьох та чотирьох пакетів гаусової форми. За вертикальною віссю відкладена амплітуда хвильового пакету в залежності від координати *x*.

На рис.2.9 представлений пакет прямокутної форми, відповідає суперпозиції трьох пакетів гаусової форми. Він має таку ж тривалість, напівширину й амплітуду, як і відповідний йому на Рис.2.9а.

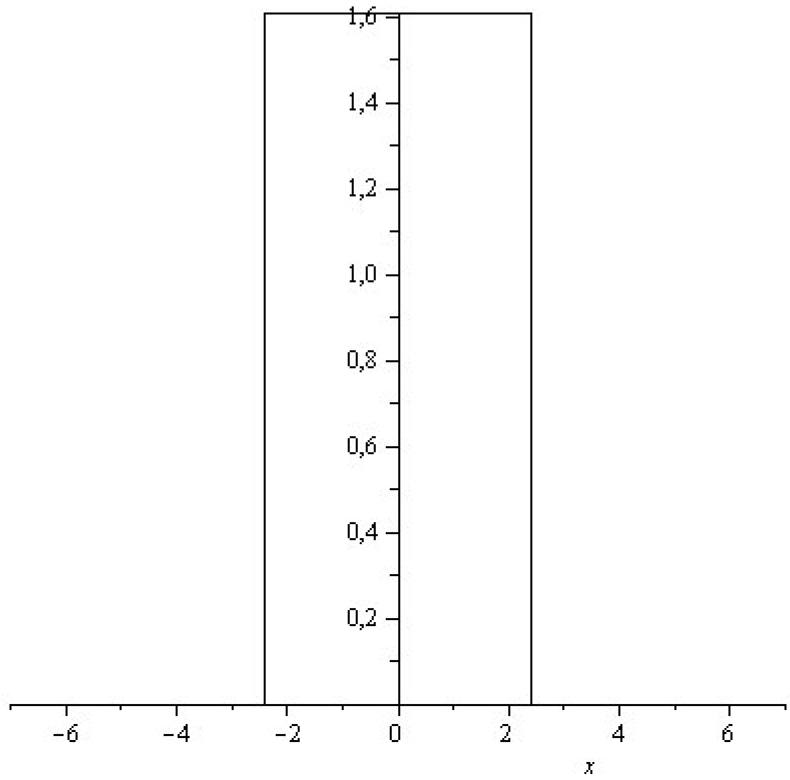


Рис.2.9а. Пакет прямокутної форми відповідний за характеристиками, до пакету, що представлено на Рис.2.9. За вертикальною віссю відкладена амплітуда хвильового пакету в залежності від координати *x*.

Кількість використовуваних гаусових пакетів не впливає на хід обчислень, але збільшує тривалість розрахунків. У разі чотирьох складових обчислення продовжується в кілька разів довше, ніж для трьох. З метою оптимізації розрахунків був обраний останній варіант. Прямокутний пакет (рис.2.9) може бути представлений у вигляді суперпозиції трьох імпульсів гаусової форми в наступному вигляді

$$\Psi = \sum_{i=1}^{3} A_i e^{-\frac{(s-a_i)^2}{2}}$$

де коефіцієнти A_i вибираються виходячи з необхідної ширини початкового сигналу. За допомогою коефіцієнтів a_i добиваємося симетричного розташування хвильового пакету. Для обчислення інтеграла в рівнянні (2.1) використовується модифікований метод перевалу [39,56]. Він полягає в наступному описі резонансних полюсів, що входять в *S (k),* у вигляді

$$\frac{2}{2k-2k_j+i\Gamma_j}=e^{\ln 2-\ln(2k-2k_j+i\Gamma_j)},$$

та розрахунку точок перевалу отриманого в експоненті виразу. Таким чином складні співвідношення між різними параметрами квантової системи та пакета будуть враховані, а регуляризована частина амплітуди буде отримана у вигляді асимптотичного розкладу. Вихідний хвильовий пакет задається виразом

$$\Psi(q>0,\tau)\sim\frac{1}{a}e^{il_0(q-\frac{1}{2}l_0\tau)}\left(\sum_i e^{g(s_i)}\sqrt{-\frac{1}{e^{g''(s_i)}}}f(s_i)\right),$$

де S_i –точка перевалу.

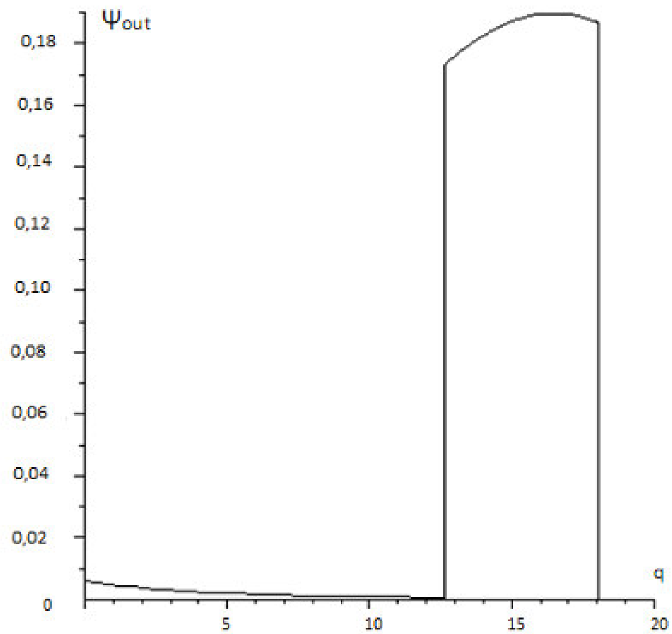


Рис. 2.10. Форма отриманого хвильового пакету, при подачі сигналу, що представляє суперпозицію трьох пакетів гаусової форми при $\Gamma_0=0.02$,

$\tau=300$, $k_1=1$, $k_0=6$. За вертикальною віссю відкладена амплітуда хвильового пакету в залежності від безрозмірної координати q.

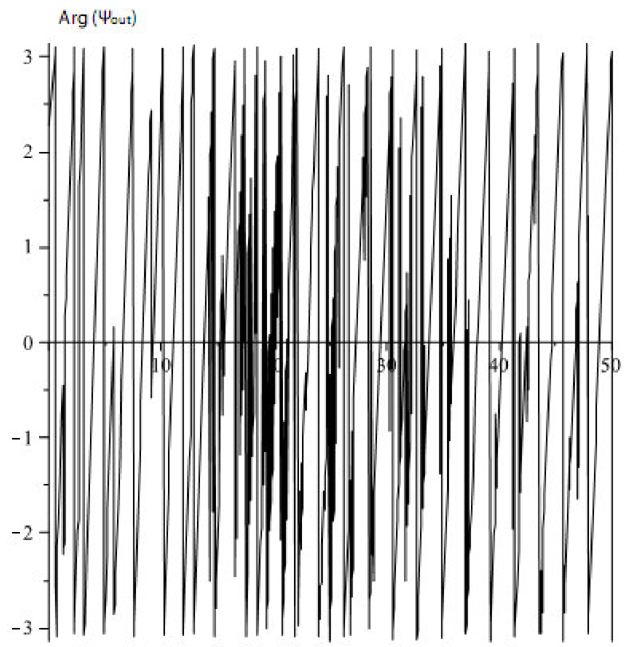


Рис. 2.11. Аргумент хвильової функції вихідного сигналу, в залежності від безрозмірної координати, при подачі імпульсу, що представляє суперпозицію трьох пакетів гаусової форми при $\Gamma_0=0.02$, $\tau=300$, $k_1=1$, $k_0=6$ після виходу з квантової системи.

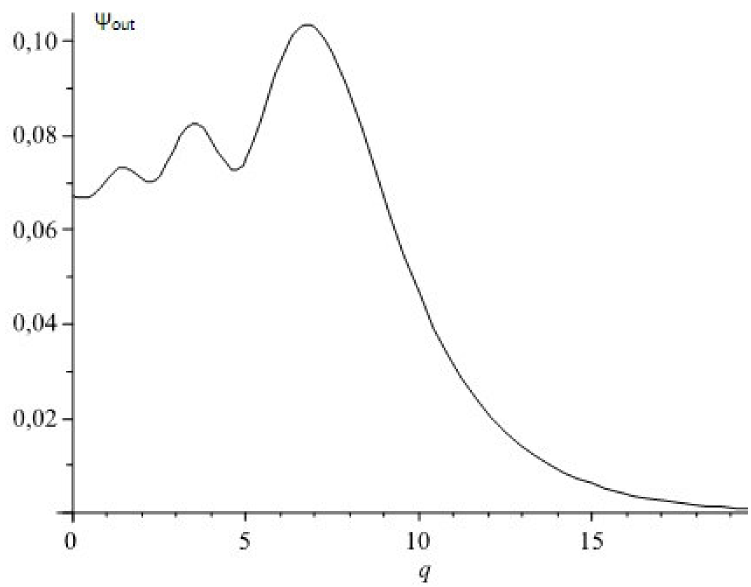


Рис. 2.12. Форма хвильового пакету, що виходить з системи, при подачі

сигналу гаусової форми при $Г_0=0.02$, $\tau=300$, $k_1=1$, $k_0=6$. За вертикальною віссю відкладена амплітуда хвильового пакету в залежності від безрозмірної координати q.

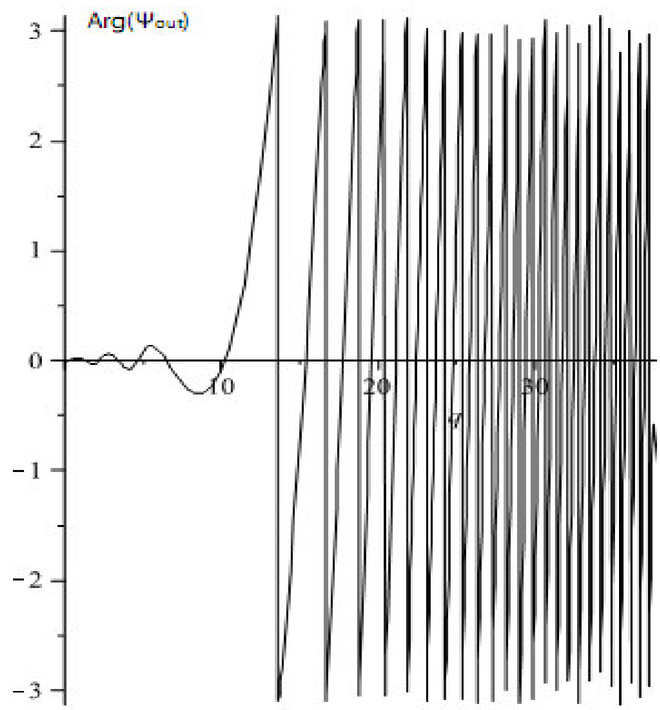


Рис. 2.13. Аргумент хвильової функції пакету, що виходить з системи, в залежності від безрозмірної координати, при подачі сигналу гаусової форми при $Г_0=0.02$, $\tau=300$, $k_1=1$, $k_0=6$.

Ми продемонстрували застосовність розглянутого підходу для дослідження процесів проходження імпульсу крізь резонансні квантові системи. Це дає можливість для детального дослідження процесу тунелювання пакетів різних форм, які можна представити суперпозицією Гаусових хвильових пакетів. Основою для цього служить те, що тунелювання пакету гаусової форми точно є розв'язуваною задачею. Представляючи сигнал, що подається у вигляді суперпозиції гаусових пакетів, можна отримати точні аналітичні розв'язки для широкого класу практичних завдань. В роботі детально досліджується випадок прямокутного пакету, представленого суперпозицією трьох гаусових пакетів. Результати були зіставлені з відповідними результатами для гаусового сигналу з тими ж характеристиками. Як ми бачимо з рис. (2.6, 2.10), прямокутний пакет демонструє набагато більше стабільності, ніж гаусовий. Дійсно, центр мас прямокутного пакету спостерігається на відстані в два рази більшій, ніж центр мас для гаусового хвильового пакету. Це означає, що швидкість першого пакету приблизно в два рази перевищує швидкість останнього. У наступних розділах роботи ми представимо це більш детально і знайдемо залежності часу затримки пакетів від їх імпульсів і характеристик системи.

Розділ 3. Опис квантових систем з довільним числом резонансних рівнів у формалізмі матриці розсіювання.

В даному розділі 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 застосованого на практиці квантового діоду. Для побудови матриці розсіювання потенціальну енергію системи розділяють на збурену і незбурену частину. Знаходять відповідні функції Гріна для кожного інтервалу діаграми потенціальної енергії, за допомогою яких обчислюють коефіцієнти відбиття та проходження крізь кожну границю системи. На основі отриманих розв'язків будується матриця власних станів системи, що пов'язана з R-матрицею системи. На основі відомого зв'язку між R- та S-матрицями знаходяться матричні елементи матриці розсіювання. Основні посилання за тематикою розділу [28,34–48,55–69].

3.1 Побудова S-матриці для довільних систем.

У цьому розділі ми наводимо всю інформацію, необхідну для розрахунку матриці розсіювання [23–28, 49,59]. Тут і далі ширину рівнів буде представлено в термінах ширини пакету, час – в часовій тривалості пакету, координати – в характерних розмірах сигналу. Припустимо, розглядається система, потенціал якої представлений на Рис.3.1.

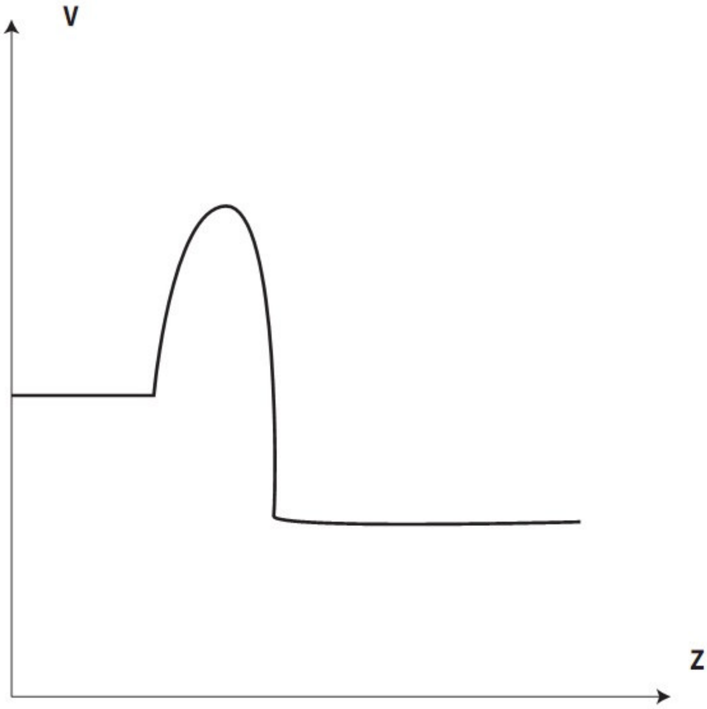


Рис 3.1. Потенціальна енергія системи. За вертикальною віссю відкладено потенціальну енергію бар’єру в залежності від просторової координати z.

Згідно розвинутому підходу, ми розбиваємо потенціал системи на збурену $\Delta V(z)$ и незбурену $V_0(z)$ частини, як це показано на Рис.3.2:

$$V(z) = \Delta V(z) + V_0(z). \tag{3.1}$$

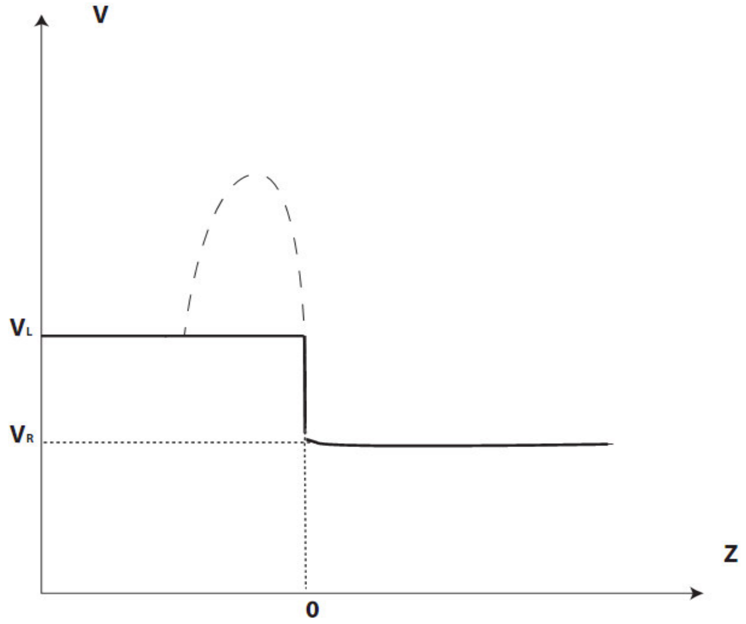


Рис 3.2. Можливе представлення потенціальної енергії системи (праворуч: суцільна лінія – незбурена частина, а пунктирна лінія – збурення). За вертикальною віссю відкладено потенціальну енергію бар’єру в залежності від просторової координати z.

Процес розсіювання може бути описаний стаціонарним рівнянням Шрьодінгера [87]:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} - V_0(z) + \upsilon\right]\Psi(z,\upsilon) = \Delta V(z)\Psi(z,\upsilon). \tag{3.2}$$

Тут *z* – відповідна просторова координата, *V₀(z)* – незбурена частина потенціальної енергії бар'єру, *v* – відповідна кінетична енергія частинки, *ΔV(z)* – збурення на відповідній ділянці бар'єру.

Таке неоднорідне рівняння може бути розв'язано з використанням функції Гріна для незбуреної частини, що є розв'язком наступного рівняння

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} - V_0(z) + \upsilon\right]\Gamma(z, z', \upsilon) = \delta(z - z'). \tag{3.3}$$

Вирішивши його, отримаємо:

для хвилі, що рухається зліва від системи z′<0,

$$\Gamma(z, z', \upsilon) = \frac{m^*}{ik_l\hbar^2}\left[e^{-ik_l(z-z')} + \frac{k_l - k_r}{k_l + k_r}e^{-ik_l(z+z')}\right], z < z',$$

$$\Gamma(z, z', \upsilon) = \frac{m^*}{ik_l\hbar^2}\left[e^{ik_l(z-z')} + \frac{k_l - k_r}{k_l + k_r}e^{-ik_l(z+z')}\right], z' < z < 0, \tag{3.4}$$

$$\Gamma(z, z', \upsilon) = \frac{2m^*}{(ik_l + ik_r)\hbar^2}e^{i(k_r z - k_l z')}, z > 0$$

для хвилі, що рухається праворуч z′>0

$$\Gamma(z,z',\upsilon) = \frac{2m^*}{(ik_l + ik_r)\hbar^2} e^{i(k_r z' - k_l z)}, z < 0,$$

$$\Gamma(z,z',\upsilon) = \frac{m^*}{ik_r\hbar^2}\left[e^{ik_r(z-z')} + \frac{k_r - k_l}{k_l + k_r} e^{-ik_r(z+z')}\right], 0 < z < z', \tag{3.5}$$

$$\Gamma(z,z',\upsilon) = \frac{m^*}{ik_r\hbar^2}\left[e^{ik_r(z-z')} + \frac{k_r - k_l}{k_l + k_r} e^{ik_r(z+z')}\right], z' < z.$$

Для рівняння Шрьодінгера без збурення

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + V_0(z) - \upsilon\right]\Psi_0^{L/R}(z,\upsilon) = 0, \tag{3.6}$$

отримаємо наступні розв'язок: для випадку, коли хвиля поширюється направо від входу в систему

$$\Psi_0^L(z,\upsilon) = e^{ik_l z} + \frac{k_l - k_r}{k_l + k_r} e^{-ik_l z}, z < 0,$$

$$\Psi_0^L(z,\upsilon) = \frac{2k_l}{k_l + k_r} e^{ik_r z}, z > 0$$

і для хвилі що розповсюджується наліво від виходу з системи

$$\Psi_0^R(z,\upsilon) \quad = \quad \frac{2k_r}{k_l + k_r} e^{-ik_l z}, \; z < 0,$$

$$\Psi_0^R(z,\upsilon) \quad = \quad e^{-ik_r z} - \frac{k_l - k_r}{k_l + k_r} e^{ik_r z}, \; z > 0.$$

Початкове рівняння може бути зведене до еквівалентного інтегрального рівняння з використанням функції Гріна – $\Gamma(z,z',v)$ [70–73,85],

$$\Psi(z,\upsilon) = \Psi_0(z,\upsilon) + \int_{-b_l}^{b_r} dz' \Gamma(z,z',\upsilon) \Delta V(z') \Psi(z',\upsilon), \tag{3.7}$$

де $\Psi_0(z,v)$ є розв'язком рівняння Шрьодінгера у відсутності збурення. Отримаємо для $z<-b_l$

$$\Psi^L(z,\upsilon) = A^l(\upsilon) e^{ik_l z} + B^l(\upsilon) e^{-ik_l z},$$

де $A^l(v)=1$ та

$$B^l(\upsilon) \quad = \quad \frac{k_l - k_r}{k_l + k_r} + \frac{m^*}{i\hbar^2 k_l} \int_{b_l}^{0} dz' \left[e^{ik_l z'} + \frac{k_l - k_r}{k_l + k_r} e^{-ik_l z'} \right] \Delta V(z') \Psi^L(z',\upsilon)$$

$$+ \quad \frac{2m^*}{i\hbar^2 (k_l + k_r)} \int_0^{b_r} dz' e^{ik_r z'} \Delta V(z') \Psi_L(z',\upsilon).$$

Для випадку $z>b_r$

$$\Psi^L(z,\upsilon) = C^l(\upsilon) e^{ik_r z} + D^l(\upsilon) e^{-ik_r z}$$

де $D^l = 0$ та

$$C^l(\upsilon) \;=\; \frac{2k_l}{k_l+k_r}+\frac{m^*}{i\hbar^2 k_r}\int_{b_l}^{0}dz'\left[e^{-ik_r z'}+\frac{k_r-k_l}{k_l+k_r}e^{ik_r z'}\right]\Delta V(z')\Psi^L(z',\upsilon)$$

$$+\quad \frac{2m^*}{i\hbar^2(k_l+k_r)}\int_0^{b_r}dz' e^{ik_r z'}\Delta V(z')\Psi_L(z',\upsilon).$$

Відповідний результат для Ψ^R буде наступним для випадку $z>b^r$

$$\Psi^R(z,\upsilon)=C^r(\upsilon)e^{ik_r z}+D^r(\upsilon)e^{-ik_r z}$$

де $D^r=1$ та

$$C^r(\upsilon) \;=\; \frac{k_r-k_l}{k_l+k_r}+\frac{m^*}{i\hbar^2 k_r}\int_0^{b_r}dz'\left[e^{-ik_r z'}+\frac{k_r-k_l}{k_l+k_r}e^{ik_r z'}\right]\Delta V(z')\Psi^R(z',\upsilon)$$

$$+\quad \frac{2m^*}{i\hbar^2(k_l+k_r)}\int_{b_l}^{0}dz' e^{-ik_l z'}\Delta V(z')\Psi_R(z',\upsilon).$$

У випадку $z<-b^l$

$$\Psi^R(z,\upsilon)=A^r(\upsilon)e^{ik_l z}+B^r(\upsilon)e^{-ik_l z},$$

де $A^r=0$ та

$$B^r(\upsilon) \;=\; \frac{2k_r}{k_l+k_r}+\frac{m^*}{i\hbar^2 k_l}\int_{b_l}^{0}dz'\left[e^{ik_l z'}+\frac{k_r-k_l}{k_l+k_r}e^{-ik_l z'}\right]\Delta V(z')\Psi^R(z',\upsilon)$$

$$+\quad \frac{2m^*}{i\hbar^2(k_l+k_r)}\int_0^{b_r}dz' e^{ik_r z'}\Delta V(z')\Psi_R(z',\upsilon).$$

Ми отримали хвильові функції $\Psi^{R/L}$, які описують стани, що знаходяться справа / зліва від досліджуваної структури, з початковим сигналом і відбитою його частиною описаними в рівняннях (3.2) і (3.4), і частинами сигналу що проходять описаними в (3.3) і (3.5) відповідно. Таким шляхом ми отримаємо коефіцієнти проходження (C^l, B^r) та відбиття (B^l, C^r) для $\Psi^{R/L}$. Ці величини можуть бути розглянуті як елементи матриці розсіювання-відбиття TR:

$$TR = \begin{vmatrix} B^l & B^r \\ C^l & C^r \end{vmatrix}.$$

Використовуючи матрицю власних станів, можна отримати R-матрицю розглянутої [5] системи

$$R = \Psi'(z,\upsilon)\Psi^{-1}(z,\upsilon). \tag{3.8}$$

Ця матриця відпочатку слугувала для опису резонансів. Вона містить в собі інформацію про зв'язані стани та низькоенергетичні резонанси. А отже теорія R-матриці пропонує ефективний спосіб для точної параметризації не тільки резонансів, а також нерезонансної частини низькоенергетичних перетинів з невеликою кількістю параметрів [49, 73]. Важливою перевагою цього методу є те, що більшість з цих параметрів має фізичний зміст.

Після того, як були обраховані елементи R-матриці, використовуючи співвідношення між R- і S-матрицями, ми можемо розрахувати останню:

$$S = (R\Psi^{+} - \Psi^{+'})^{-1}(R\Psi^{-} - \Psi^{-'}), \tag{3.9}$$

де, Ψ^{+} та Ψ^{-} – це частини, що розбігаються та збігаються у відповідних хвильових функціях (см.[86–90]). Таким чином розраховуємо матрицю розсіювання квантової системи.

3.2 Матриця розсіювання для квантового діода

Тунельний квантовий діод – напівпровідниковий діод, що містить *p-n*-перехід з дуже малою товщиною замикаючого шару. Принцип дії квантового діода базується на проходженні вільних носіїв заряду (електронів) крізь вузький потенціальний бар'єр, завдяки квантово-механічному процесу тунелювання [35–37, 50–55]. Оскільки ймовірність тунельного просочування електронів крізь бар'єр в значній мірі визначається шириною області просторового заряду в *p-n*-переході, квантові діоди виготовляють на основі вироджених напівпровідників (з концентрацією домішок до 10^{25} – 10^{27} м$^{-3}$). При цьому виходить різкий *p-n*-перехід з товщиною замикаючого шару 5-15 нм. При виготовленні тунельних діодів зазвичай застосовують Ge та GaAs; рідше використовують Si, InSb, In As, PbTe, GaSb, SiC та інші напівпровідникові матеріали. Тунельний діод застосовується як багатофункціональний прилад (посилення, генерація, перемикання та ін.). Для роботи переважно в області НВЧ. Він може працювати і на більш низьких частотах, проте його ефективність в тому випадку значно нижче, ніж, наприклад, транзистора.

Застосуємо розвинений підхід до розрахунку матриці розсіювання структури, діаграма потенціальної енергії якої зображена на Рис.2, це реальний квантовий діод, що знаходить широке застосування в сучасній електроніці.

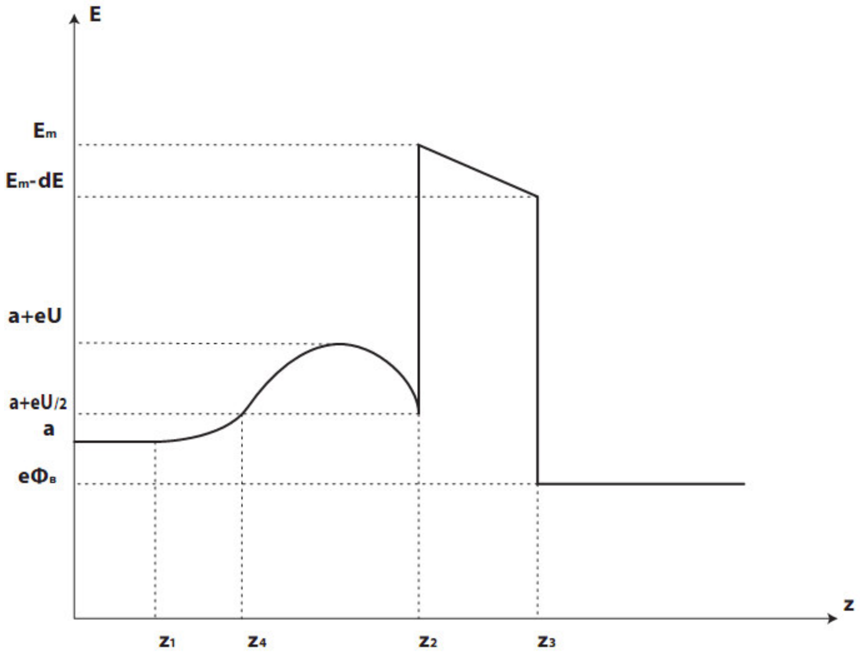


Рис 3.3. Потенціальна енергія досліджуваного діода. За вертикальною віссю відкладено потенціальну енергію бар’єру в залежності від просторової координати z.

Представлення потенціальної енергії у вигляді збуреної і незбуреної частини, для однієї і тієї ж системи може мати різні варіації. На Рис.3 зображено одне з можливих представлень незбуреної частини даного потенціальної енергії, яка і була використана для розрахунків даної задачі. Слід вказати, що збурення на ділянці (z_1; z_4) задавалося експоненційної функцією, на ділянці (z_4; z_2) – у вигляді функції Гаусса, а на ділянці (z_2; z_3) – лінійною функцією, які були пов'язані з допомогою Θ-функцій.

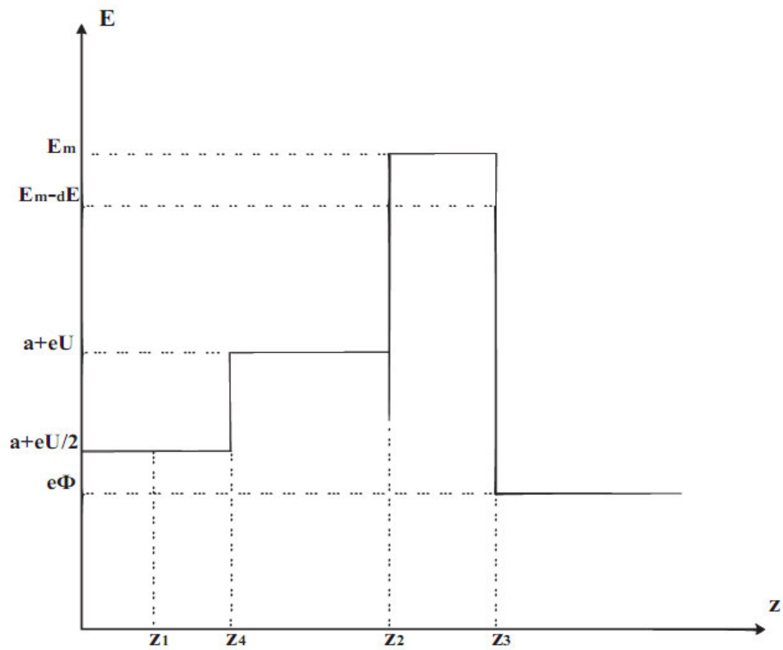


Рис 3.4. Представлення потенціальної енергії за відсутності збурення. За вертикальною віссю відкладено потенціальну енергію бар'єру в залежності від просторової координати z.

Згідно з розвиненим підходом, побудуємо розв'язки рівняння Шрьодінгера для незбуреної частини і отримаємо хвильові функції для кожної розглянутої області.

Для пакета, що поширюється ліворуч від входу в систему, маємо власні хвильові функції у відповідних областях енергій

$$\Psi_1^L = e^{ik_1 z} + Ae^{-ik_1 z},\ z < 0;$$

$$\Psi_2^L = Be^{ik_2 z} + Ce^{-ik_2 z},\ 0 < z < z_1;$$

$$\Psi_3^L = De^{ik_3 z} + Ee^{-ik_3 z},\ z_1 < z < z_4;$$

$$\Psi_4^L = Fe^{ik_4 z} + Ge^{-ik_4 z},\ z_4 < z < z_2;$$

$$\Psi_5^L = He^{ik_5 z} + Ne^{-ik_5 z},\ z_2 < z < z_3;$$

$$\Psi_6^L = Me^{ik_6 z},\ z_3 < z.$$

Також, для пакету, що поширюється праворуч від виходу із системи, маємо власні хвильові функції у відповідних областях енергій

$$\Psi_1^R = e^{-ik_6 z} + A' e^{ik_6 z},\ \mathrm{z}_3 < z;$$

$$\Psi_2^R = B' e^{-ik_5 z} + C' e^{ik_5 z},\ z_2 < z < z_3;$$

$$\Psi_3^R = D' e^{-ik_4 z} + E' e^{ik_4 z},\ z_4 < z < z_2;$$

$$\Psi_4^R = F' e^{-ik_3 z} + G' e^{ik_3 z},\ z_1 < z < z_4;$$

$$\Psi_5^R = H' e^{-ik_2 z} + N' e^{ik_2 z},\ 0 < z < z_1;$$

$$\Psi_6^R = M' e^{-ik_1 z},\ z < 0.$$

Далі, використовуючи умови неперервності хвильових функцій

$$\Psi_i(z_i) = \Psi_{i+1}(z_{i+1}),$$
$$\Psi_i'(z_i) = \Psi_{i+1}'(z_{i+1}),$$

знайдемо амплітуди хвильових функцій та відповідні функції Гріна, для $z'<0$

$$G_0^1(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_1}\left[e^{-ik_1(z-z')}+Ae^{-ik_1(z+z')}\right],\ z<z';$$

$$G_0^2(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_1}\left[e^{ik_1(z-z')}+Ae^{-ik_1(z+z')}\right],\ z'<z<0;$$

$$G_0^3(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_1}\left[Be^{-ik_1z'+ik_2z}+Ce^{-ik_1z'-ik_2z}\right],0<z<z_1;$$

$$G_0^4(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_1}\left[De^{-ik_1z'+ik_3z}+Ee^{-ik_1z'-ik_3z}\right],0<z<z_1;$$

$$G_0^5(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_1}\left[Fe^{-ik_1z'+ik_4z}+Ge^{-ik_1z'-ik_4z}\right],\mathrm{z}_4<z<z_2;$$

$$G_0^6(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_1}\left[He^{-ik_1z'+ik_5z}+Ie^{-ik_1z'-ik_5z}\right],\mathrm{z}_2<z<z_3;$$

$$G_0^7(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_1}\left[Me^{-ik_1z'+ik_6z}\right],\mathrm{z}_3<z.$$

А також для $z'>z_3$

$$G_1^7(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_6}\left[e^{ik_6(z-z')}+A'e^{ik_6(z+z')}\right],\ z'<z;$$

$$G_1^6(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_6}\left[e^{-ik_6(z-z')}+A'e^{ik_6(z+z')}\right],\ z_3<z<z';$$

$$G_1^5(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_6}\left[B'e^{-ik_6z'+ik_6z}+C'e^{ik_6z'+ik_6z}\right],\mathrm{z}_2<z<z_3;$$

$$G_1^4(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_6}\left[D'e^{ik_5z'-ik_4z}+E'e^{ik_5z'+ik_4z}\right],\ \mathrm{z}_4<z<z_2;$$

$$G_1^3(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_4}\left[F'e^{ik_4z'-ik_3z}+G'e^{ik_4z'+ik_3z}\right],\ \mathrm{z}_1<z<z_4;$$

$$G_1^2(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_3}\left[H'e^{ik_3z'-ik_2z}+I'e^{ik_3z'+ik_2z}\right],\ 0<z<z_1;$$

$$G_1^1(z,z',e)=\frac{m^*}{\hbar^2 ik_2}\left[M'e^{ik_2z'-ik_1z}\right],\ z<0.$$

Підставивши отримані вирази в (3.7), знаходимо амплітуди відбиття і проходження для випадку збуреного потенціалу. Які, в свою чергу, є розв’язками рівняння Ліппмана-Швінгера [85,86] з наступною інтерпретацією. Різниця між хвильовими функціями початкового стану і хвильовими функціями, після процесу розсіювання, виражається у присутності деякої додаткової компоненти. Наявність цієї компоненти пов'язана з існуванням збурення $\Delta V_1(z)$ на ділянці $(z_1;\ z_4)$, $\Delta V_2(z)$ на ділянці $(z_4;\ z_2)$ і так далі. Після того, як знайдено хвильові функції для кожного інтервалу, можна побудувати матрицю власних значень Ψ і знайти R-матрицю,

$$R=\hat{\Psi}'\,\hat{\Psi}^{-1}.$$

Тепер, використовуючи зв'язок між R і S матрицями

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

знаходимо відповідну матрицю розсіювання.

Розділ 4. Дослідження динамічних характеристик квантових систем

Даний 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. Наведено графіки залежності часу затримки в залежності від параметрів системи та початкового пакету. 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. Основні посилання за тематикою розділу [32–48, 76–85].

4.1 Час затримки сигналів гаусової форми для випадку квантової точки

Квантова точка – фрагмент провідника або напівпровідника, обмежений за всіма трьома просторовими вимірами, такий що містить електрони провідності. Точка повинна бути досить маленькою, настільки, щоб квантові ефекти були істотні. Це досягається, якщо кінетична енергія електрона, обумовлена невизначеністю його імпульсу, буде істотно більше всіх інших енергетичних масштабів [76]. В першу чергу, більше температури, вираженої в енергетичних одиницях. Зустрічаються наступні технологічні аналоги назв в науково-технічній літературі для квантових точок: наночастинки, нанокристали. Існує безліч технічних рішень для застосування квантових точок [77]. Більшість ідей пов'язано з нанофотонікою, але не тільки. Деякі можливі області застосування квантових точок: світловипромінюючі діоди; лазери; сонячні батареї; одноелектронні транзистори.

У розділі 2.2 цієї роботи нами було отримано вираз для аргументу хвильової функції пакету, який виходить з квантової системи з одним резонансним рівнем (квантової точки), для випадку тунелювання хвильового пакету гаусової форми

$$Arg(\psi)=\frac{1}{2}arctg(\tau)+\frac{(q-l_0\tau)^2\tau}{2(1+\tau^2)}-arctg\left(\frac{\rho_i\tau+l_i-l_0}{q+\rho_i-l_i\tau}\right)$$

Для розрахунку часу затримки знайдемо похідну від $Arg(\psi)$ за енергією:

$$\Delta t = \frac{dArg(\psi)}{dE} = \frac{dArg(\psi)}{2pdp}$$

де p це імпульс хвильового пакету, що залежить від початкового імпульсу і енергетичних рівнів системи. Знайдемо залежність часу затримки від основних параметрів системи та пакету.

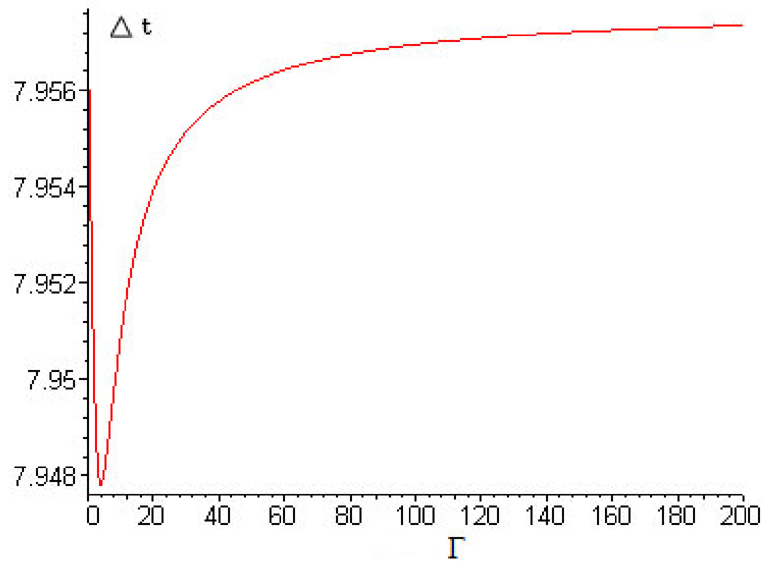


Рис.4.1. Залежність часу затримки (представленого в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) сигналу в системі, залежно від значень ширини резонансного рівня Г при a=1, t_a=1, t=100, x=300, k_0=1, k_i=1.

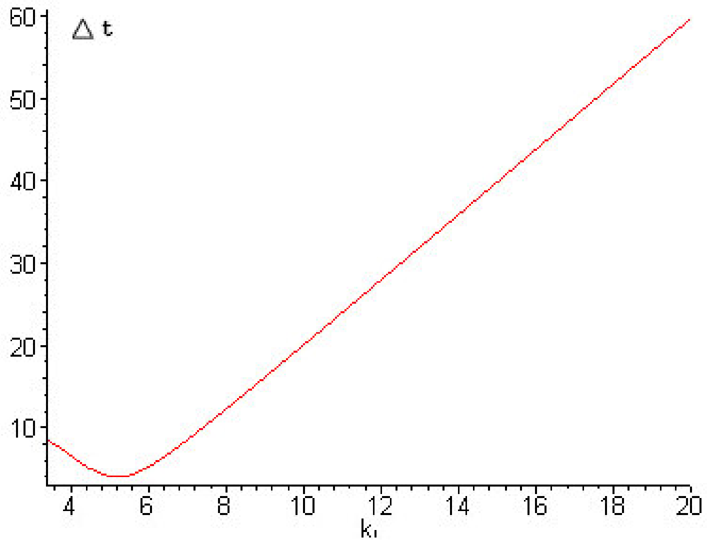


Рис.4.2. Залежність часу затримки (представленого в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) сигналу в системі залежно від рівня енергії резонансу k_i при t_a=1, t=100, a=1, x=300, k_0=1, Г=1.

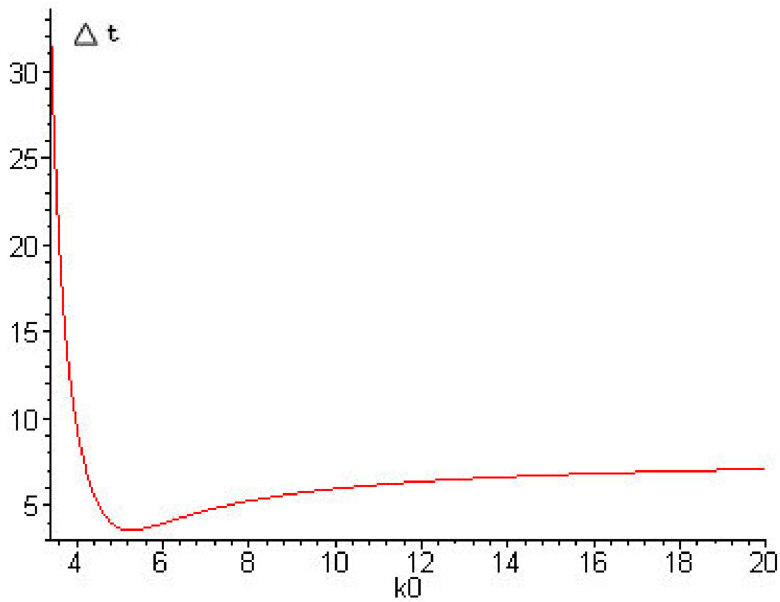


Рис.4.3. Залежність часу затримки (представленого в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) сигналу в системі від початкового імпульсу хвильового пакету k_0 при t_a=1, t=100, a=1, x=300, k_i=1, Г=1.

З Рис.4.1 можна побачити, що ширина резонансного рівня впливає на час проходження системи, і при деяких параметрах Г пакет буде проходити трохи швидше, однак ця залежність не є суттєво значущою.

Складнішою є залежність Δt від енергії резонансних рівнів представлена на Рис.4.2. Як можна побачити, навіть невелика зміна k_i призводить до великих коливань часу затримки. Але існують точки, де функція досягає мінімуму, в якій буде спостерігатися якнайшвидша передача сигналу. При $k_i \to \infty$ будемо мати $\tau \to \infty$, що відповідає внутрішньому розсіюванню пакету в системі.

Як і у випадку з k_i, залежність Δt від k_0 має свої мінімуми, при яких швидкість проходження сигналу буде максимальною. Основною відмінністю Рис.4.3 від Рис.4.2 є те, що при великих значеннях k_0, час затримки стає постійним.

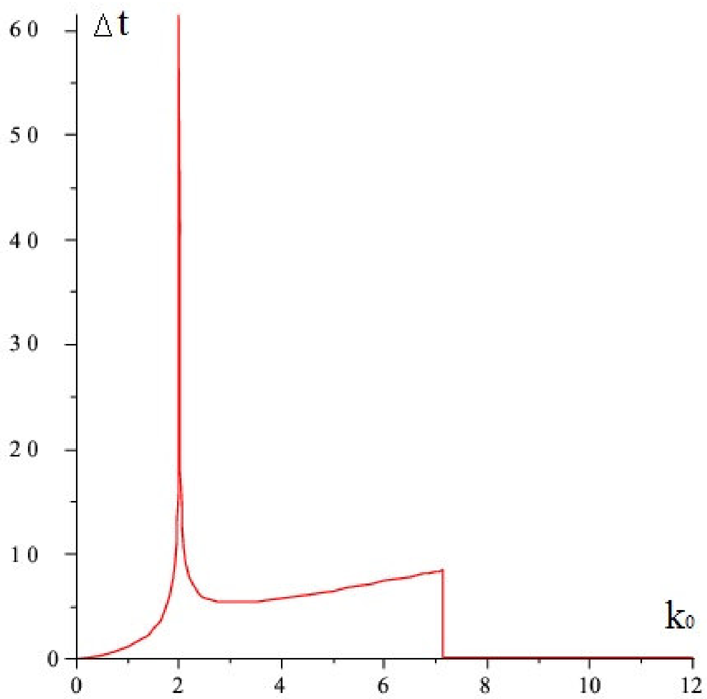


Рис.4.4. Залежність часу затримки (представленого в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) сигналу в

системі від початкового імпульсу хвильового пакету k_0 при t_a=1, t=100, a=1, x=300, k_i=5, Г=1.

Через внутрішні особливості систем з резонансними рівнями, без точних розрахунків визначити, як довго сигнал буде знаходитися в системі, дуже складно. Використовуючи запропонований метод, стало можливим розрахувати час затримки сигналу різних конфігурацій, при проходженні таких систем як двубар'єрні діоди або транзистори квантового тунелювання. Показано, що при заданих значеннях параметрів системи і імпульсу може спостерігатися повне внутрішнє розсіювання, тобто хвильовий пакет не буде виходити з квантової системи, а час затримки прямує до нескінченості.

4.2 Час затримки сигналів прямокутної форми для випадку квантової точки

У розділі 2.3 нами досліджувався процес проходження хвильового пакету прямокутної форми, що представляється нами у вигляді суперпозиції трьох гаусових пакетів

$$\Psi = \sum_{i=1}^{3} A_i e^{-\frac{(s-a_i)^2}{2}} .$$

Було обчислено аналітичне подання аргументу хвильової функції пакета що виходить з квантової системи. Згідно розділу 1.3, використовуючи отриманий вираз, було розраховано час затримки даного хвильового пакету.

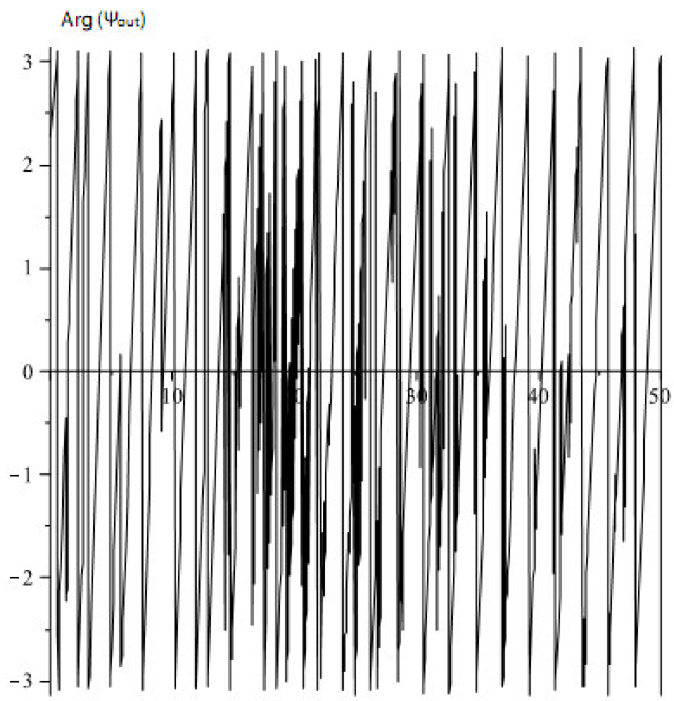


Рис. 4.5. Аргумент хвильової функції вихідного сигналу при подачі

пакету, що представляє суперпозицію трьох гаусових пакетів, в залежності від безрозмірної координати q при Γ_0=0.02, τ=300, k_1=1, k_0=6.

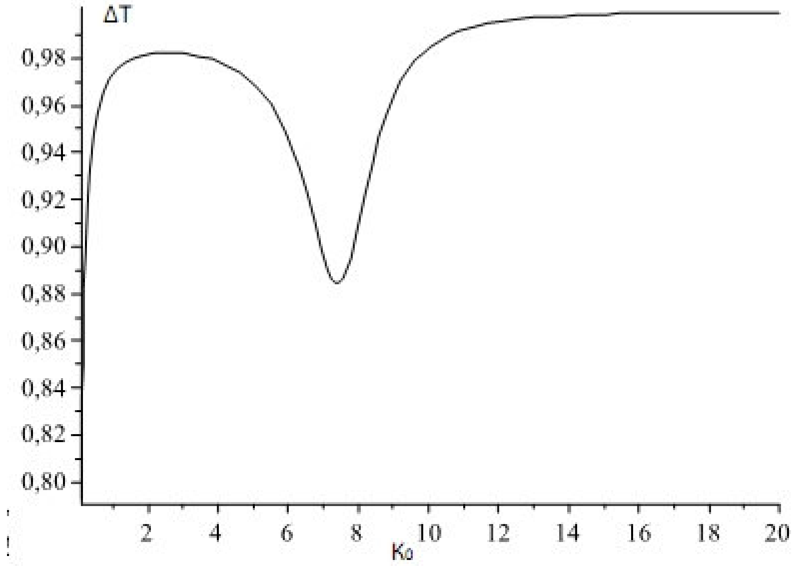


Рис. 4.6. Час затримки (представлений в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) в залежності від імпульсу початкового пакету прямокутної форми представленого у вигляді суперпозиції трьох гаусових пакетів при Γ_0=0.02, τ=300, k_1=1, q=30

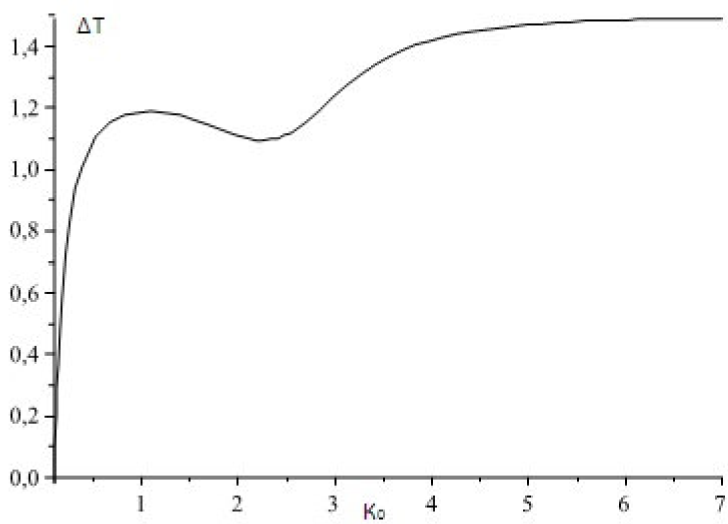


Рис. 4.7. Час затримки (представлений в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) в залежності від

імпульсу початкового пакету прямокутної форми представленого у вигляді суперпозиції трьох гаусових пакетів при Γ_0=0.02, τ=300, k_1=1, q=30

Через внутрішні особливості систем з резонансними рівнями, без точних розрахунків визначити, як довго сигнал буде знаходитися в системі, дуже складно. Використовуючи запропонований метод, стало можливим розрахувати час затримки сигналу різних конфігурацій, при проходженні таких систем як двубар'єрні діоди або транзистори квантового тунелювання.

Показано, що при заданих значеннях параметрів системи і імпульсу, може спостерігатися повне внутрішнє розсіювання. Тобто хвильовий пакет не буде виходити з квантової системи.

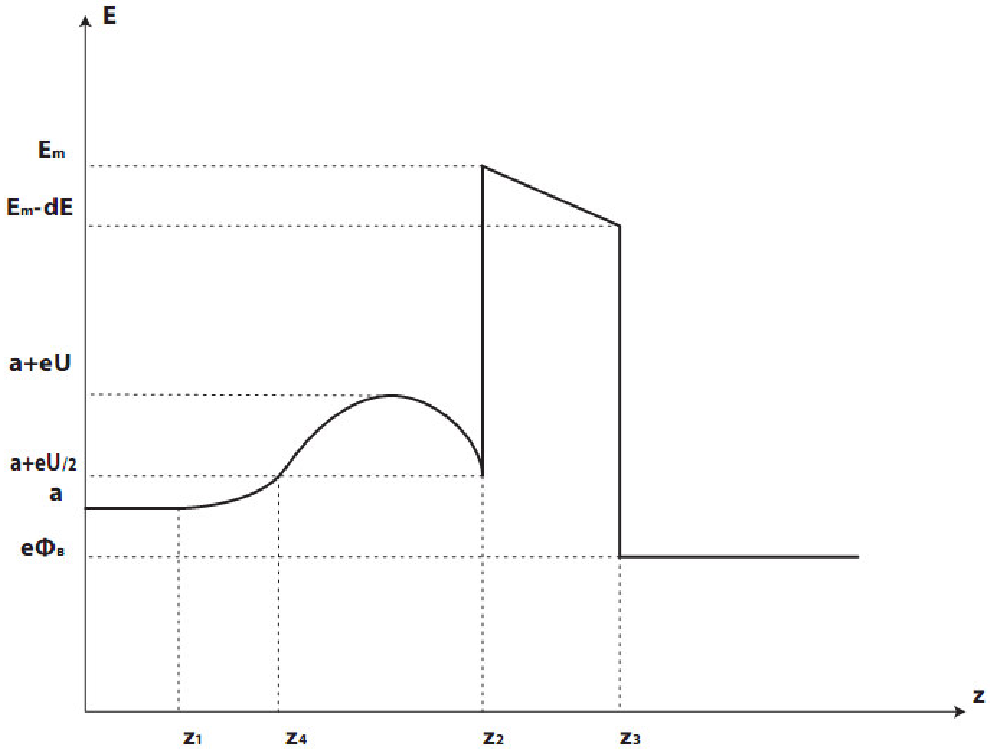
Ми продемонстрували можливості розвиненого підходу для вивчення поширення хвильових пакетів крізь відкриті квантові системи з резонансними рівнями, який заснований на модифікованому методі перевалу і формалізмі S-матриці. Це дає широкі можливості для дослідження процесу тунелювання.

Показано, що проходження гаусового пакету – є точно розв'язуваною проблемою. Представляючи форму сигналу, що подається, у вигляді суперпозиції гаусових пакетів, можна отримати точні аналітичні розв'язки для широкого класу задач застосовуваних на практиці. У цій роботі, форма прямокутного пакету представлена як суперпозиція трьох гаусових імпульсів і результати були зіставлені з результатами для сигналу гаусової форми з тими ж характеристиками.

Як згадувалося в розділі 2.3, прямокутний пакет демонструє набагато більшу стабільність форми, ніж гаусовий. Дійсно, центр мас прямокутного пакету спостерігається на відстані в два рази більшій, ніж центр мас для гаусова імпульсу. Це означає, що швидкість першого пакету приблизно в два рази перевищує швидкість останнього. Те ж саме можна побачити на рис. 4.6 та 4.7. Для подаваних пакетів з імпульсом $k_0 = 1$ час затримки для хвильового пакету гаусової форми майже в два рази більше, ніж час затримки для прямокутного пакета. Звідси можна зробити висновок, що використання прямокутних пакетів при передачі інформації повинно бути більш вигідним в наслідок того, що має місце більша швидкість тунелювання. Крім того, стабільна форма прямокутних пакетів робить їх набагато більш легко детектованими для електронних пристроїв.

4.3 Час затримки для квантового діода

У розділі 3.3 даної роботи був досліджений квантовий діод, енергетична діаграма якого мала вигляд:



Для даного приладу, що має широке практичне застосування, була розрахована матриця розсіювання.

Застосуємо отримані результати для знаходження часу тунелювання хвильового пакету гаусової форми крізь даний діод. Форма пакету описується функцією

$$\Psi(x) = e^{-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2}},$$

де a – ширина пакета. Ми використовуємо відоме перетворення Фур'є для цієї функції і безрозмірну параметризацію, в якій t_a тривалість імпульсу, l_0 і l_j відповідно положення центру пакету і полюсів S-матриці в імпульсному просторі, Γ_j ширина j-го резонансу. Використовуючи граничні умови, ми знаходимо точки перевалу. Розглядаючи ці точки, отримуємо суперпозицію від кожного результату.

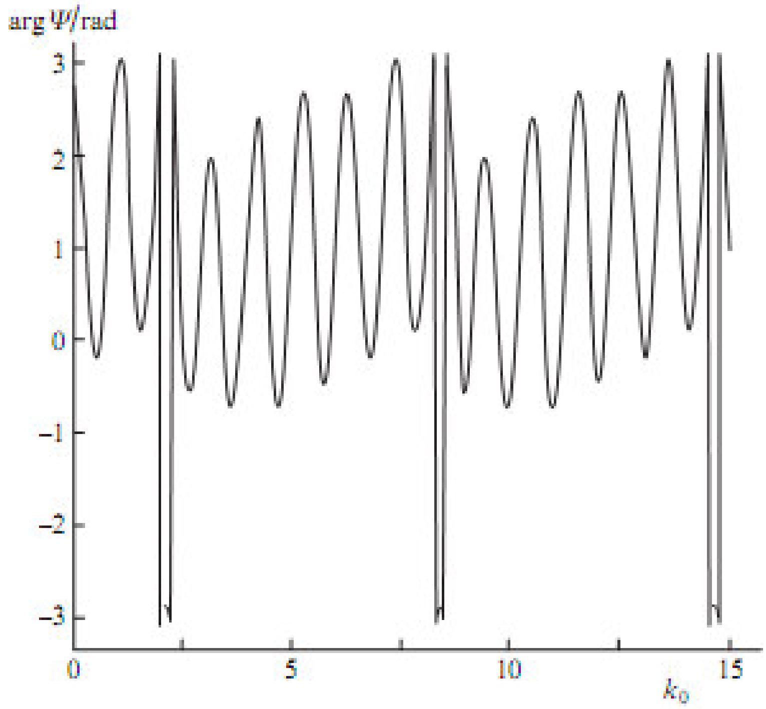


Рис. 4.8. Аргумент хвильової функції вихідного сигналу при проходженні пакета гаусової форми крізь квантовий діод, в залежності від імпульсу початкового хвильового пакету, при Γ=1, k_1=1, k_2=1, k_3=2, k_4=5, k_5=1.

Потім, після інтеграції, ми отримуємо хвильову функцію пакета що виходить з системи. Після чого знаходимо її аргумент Рис. 4.8. Взявши похідну, звідки знаходимо час затримки Рис. 4.9-4.10.

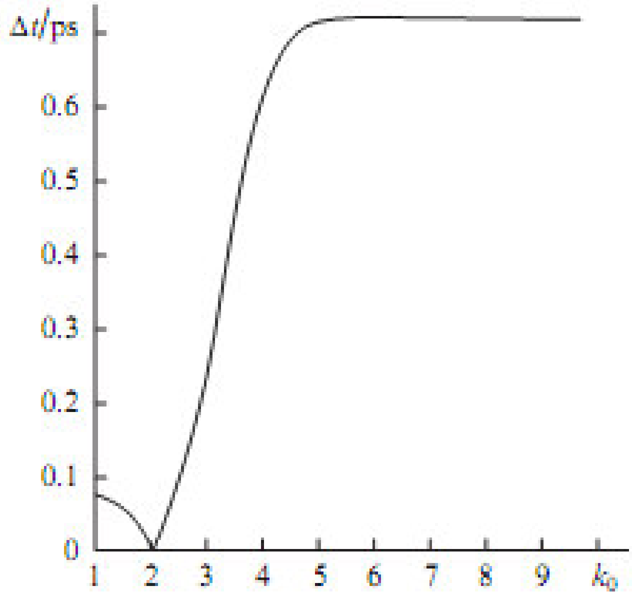


Рис. 4.9. Час затримки (представлений в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) хвильового пакету при проходженні сигналу гаусової форми крізь діод залежно від імпульсу k_0 початкового сигналу при Г=1, k_1=1, k_2=1, k_3=2, k_4=5, k_5=1.

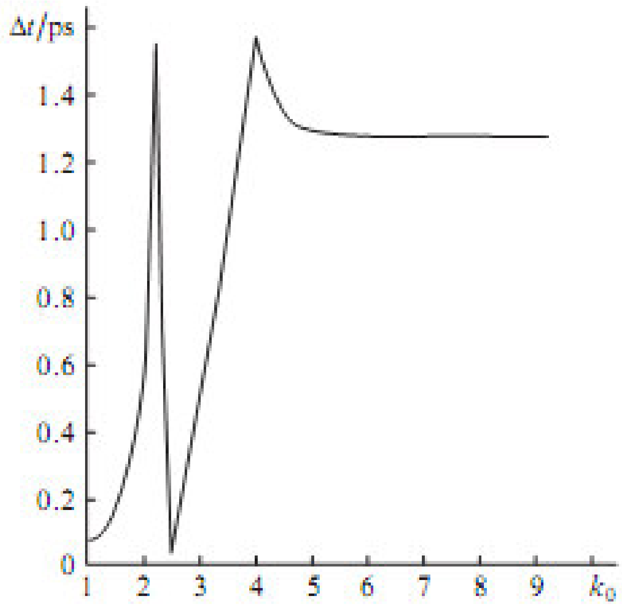


Рис.4.10. Час затримки (представлений в безрозмірних одиницях, що відповідають часовій тривалості початкового пакету) хвильового пакету при

проходженні сигналу гаусової форми крізь діод, залежно від імпульсу k_0 початкового сигналу при Г=1, k_1=1, k_2=3, k_3=4, k_4=4, k_5=1.

Таким чином, продемонстровано практичну перевагу аналітичного методу. Аргумент хвильової функції пакету, що виходить, представлений на Рис. 4.8. Як видно з Рис. 4.9 і 4.10, для деяких значень імпульсу початкового хвильового пакету, спостерігається мінімальний час затримки, що відповідає максимальній швидкості тунелювання даного пакета крізь розглянутий діод. Подальша зміна імпульсу не приводить до зменшення часу затримки. При досягненні деякого значення збільшення імпульсу не відбивається істотним чином на часі затримки пакета. В залежності від енергетичних характеристик аналізованої системи можна спостерігати одну Рис.4.9 або декілька Рис.4.10 смуг резонансного тунелювання. Тобто в рамках однієї системи, можна домогтися високої швидкості пропускання пакетів декількох різних імпульсних характеристик. Це може знайти своє застосування в процесі шифрування при передачі даних.

Висновки

Дисертація присвячена 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 значення 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. У дисертації розв’язано ряд актуальних проблем з дослідження динамічних характеристик тунелювання хвильових пакетів крізь квантові системи. 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. Розширено область застосовності даного методу на випадок систем, що характеризуються великою шириною резонансних рівнів. Це дає змогу більш формалізованого розгляду задач що вивчаються. При дослідженні проходження хвильового пакету гаусової форми крізь квантову систему з одним резонансним рівнем було продемонстровано, що застосований модифікований метод перевалу показав високу ступінь збігу результатів з точним розв'язком. 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.

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.

У роботі досліджувався процес тунелювання хвильових пакетів крізь відкриті квантові системи з резонансними рівнями. В основі використаного підходу лежить формалізм матриці розсіювання, а також використання безрозмірних змінних і модифікованого методу перевалу. Ефективність даного методу, продемонстрована при дослідженні тунелювання хвильових пакетів прямокутної і гаусової форм крізь квантову точку і квантовий діод.

Однією з характерних особливостей застосування модифікованого методу перевалу, є облік полюсів матриці розсіювання. Використовуючи у виразі для фази хвилі доданок *ln S (l)*, ми враховуємо вплив полюсної структури квантової системи на особливості амплітуди, що є незаперечною перевагою методу, що було використано. Оскільки всі особливості амплітуди, як аналітичної функції, будуть знайдені в рівнянні отриманому з умов стаціонарності.

Раніше, розв’язок поставлених проблем, наводився в термінах вузьких і широких хвильових пакетів (залежно від ширини пакетів і геометричних характеристик системи) [78–82], що робило використовувані підходи не універсальними. У зв'язку з цим, опис геометричних характеристик системи відбувався в термінах характеристик подаваного пакета (його ширини). Як наслідок, всі сигнали мають одиничну ширину, що дозволяє узагальнити даний підхід і поширити його на сигнали довільної ширини. Найбільш важливим в роботі є те, що вперше у загальному вигляді отримано аналітичний розв’язок задачі про тунелювання хвильових пакетів крізь квантові системи з резонансними рівнями. Для цього в дисертації запропоновано низка нових модифікацій відомих математичних методів та фізичних підходів. Серед них слід відзначити використання формалізму матриці розсіювання у поєднанні з методом перевалу, доповненим у роботі умовами визначення точок стаціонарності з метою виділення таких особових точок, що визначають лінії найшвидшого спадання. Ще одним важливим елементом, запропонованим у дисертації є використання безрозмірних змінних, що дало можливість застосувати метод розв’язку для «вузьких» та «широких» хвильових пакетів, одночасний розгляд яких в рамках єдиного підходу раніше вважався неможливим.

Слід також відзначити, що запропонований підхід до зазначеної проблеми створює ефективний спосіб для точної параметризації не тільки резонансів, а також нерезонансної частини низькоенергетичних перетинів з невеликою кількістю параметрів.

При дослідженні проходження хвильового пакету гаусової форми крізь квантову систему з одним резонансним рівнем, було продемонстровано, що застосовуваний модифікований метод перевалу показав гарний збіг результатів з точним розв'язком.

Подальше застосування запропонованого підходу до тунелювання хвильового пакету прямокутної форми, представленого за допомогою Θ-функцій Хевісайда, показало, високий ступінь збігу результатів з точним розв'язком при невеликих значеннях ширини енергії резонансних рівнів. Однак, при досить великих значеннях цього параметра, розглянутий метод показав втрату малих гармонік у формі вихідного пакета. При цьому, облік більшої кількості членів асимптотичного розкладу, в значній мірі покращує збіг результатів. Що говорить про ефективності застосування даного методу. Крім того, показано, що як і у випадку сигналу гаусової форми, на виході з системи отримуємо сигнал, форма якого описується erfc-функцією (стандартною функцією помилки). Легко бачити, що це відбувається тому, що вхідний сигнал не залежить від власних параметрів системи, що визначають форму вихідного сигналу. Отримуємо, що незалежно від форми вхідного сигналу виходить пакет визначається суперпозицією *erfc*-функцій різних аргументів. Значення ж аргументів визначаються формою вхідного пакета.

Одним з можливих представлень прямокутного пакету, є розгляд його у вигляді суперпозиції пакетів гаусової форми. Для розрахунків була вибрана конфігурація з трьох гаусових пакетів близьких за шириною. Вибір параметрів для даних пакетів здійснюється з міркувань симетрії і необхідної ширини генерованого сигналу. Показано, що кількість розглянутих імпульсів гаусової форми не впливає на хід розрахунку, а тільки на його тривалість. Опис процесу тунелювання проводився на основі формалізму S-матриці і модифікованого методу перевалу. В ході обчислень були отримані аналітичні вирази, що описують форму вихідного пакету, а також аргумент його хвильової функції залежно від параметрів системи і подаваного сигналу. Порівняння отриманих результатів з результатами проходження сигналу, що представляє собою один пакет гаусової форми, показало меншу стабільність форми останнього. Крім того, при одних і тих же характеристиках системи і імпульсу подаваного сигналу, пакет прямокутної форми спостерігався на більшій відстані від виходу з системи, ніж пакет гаусової форми. Використовуючи отриманий вираз, що описує аргумент хвильової функції, були розраховані часи затримки розглянутих сигналів. Отримані результати, представлені у вигляді графіків, також підтвердили, що швидкість тунелювання хвильового пакету прямокутної форми перевищує швидкість другого сигналу. Таким чином показано, що використання сигналів прямокутної форми є більш пріоритетним перед сигналами гаусової форми. Причинами цього є: велика ймовірність розпізнавання детекторами сигналу, що виходить з системи, зважаючи на більшу стабільність форми, а також, що більш важливо, велика швидкість тунелювання.

Крім квантових точок в роботі досліджувався процес тунелювання хвильових пакетів гаусової форми крізь квантовий діод. Щоб побудувати матрицю розсіювання даної системи, її потенціальна енергія була представлена у вигляді суперпозиції збуреної і незбуреної складових частин. Після чого вирішувалося рівняння Шрьодінгера, що описує поширення хвилі ліворуч і праворуч для незбуреної частини потенціальної енергії. Знаходилися функції Гріна, для незбуреного потенціалу, які в свою чергу використовувалися для розв’язку задачі розсіювання з урахуванням збурення. Після чого, використовуючи рівняння Ліппмана-Швінгера, розв’язок було узагальнено і на збурену частину потенціалу. Таким чином, було отримано аналітичний вираз залежності аргументу хвильової функції пакета, що виходить, від характеристик системи і подаваного сигналу. В такий спосіб, були розраховані коефіцієнти проходження та відбиття. Використовуючи ці коефіцієнти, знаходимо значення матриці розсіювання діода, що дає можливість детально досліджувати процес тунелювання. Отримана матриця розсіювання діода, дозволила вивчити динамічні характеристики тунелювання хвильового пакету гаусової форми. Для досліджуваного сигналу була визначена амплітуда хвильового пакета, що виходить із системи. Розрахована і проілюстрована залежність часу затримки від характеристик початкового сигналу при різних внутрішніх характеристиках системи. Використовуючи результати, отримані для пакету гаусової форми, розраховано час затримки сигналу довільної форми при тунелюванні його крізь розглянутий діод. Специфічній поведінці спостережуваної залежності часу тунелювання від параметрів системи і пакета, можна знайти застосування на практиці. Як було сказано у вступі, проблема резонансного тунелювання крізь відкриту квантову систему не була вирішена в загальному вигляді. Тому отримані результати можуть мати широке застосування в мікроелектроніці. Використовуючи розроблені програмні засоби, стало можливим підібрати оптимальні параметри хвильового пакету для розглянутих систем. Розвинений метод є універсальним і дозволяє вивчати процес тунелювання хвильових пакетів різної форми крізь довільні квантові системи з резонансними рівнями. Отримані аналітичні результати матимуть велике теоретичне і практичне застосування, оскільки точного універсального розв’язку поставлена задача ще не має. А їх отримання відкриває широкі можливості до пришвидшення роботи електронних приладів та передачі даних.

Література.

1. Бройер Х.- П. Теория открытых квантовых систем. / Бройер Х.- П., Петруччионе Ф. – Москва: РХД, 2010.

2. Cardamone D.M.Controlling Quantum Transport through a Single Molecule/ D.M. Cardamone, C.A. Stafford, Mazumdar S.// Nano Lett. – 2006. – V. 6 (11). – P. 2422–2426

3. Winful H. G. Tunneling time, the Hartman effect, and superluminality: A proposed resolution of an old paradox / Winful H. G. // Physics Reports. – 2006. – V.436. – P.1–69.

4. Jost Bradley M. One-dimensional photonic bandgap structures and the analogy between optical and quantum mechanical tunnelling/ Jost Bradley M.//Eur. J. Phys. –1997. –Vol. 18. – P.108–112.

5. Kadanoff L. P. Quantum Statistical Mechanics. Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems/ Kadanoff L. P., Baym G. – New York: W.A. Benjamin, 1962

6. Ferry D.K. Physics of Non-Linear Transport in Semiconductors/ D.K. Ferry, J.R. Barker, C. Jacoboni. – New York: Plenum, 1980.

7. Vassell M. Multibarrier tunneling in Ga1−x Al x As/GaAs heterostructures/ Vassell M., Johnson L., Lockwood H. // J.Appl.Phys. – 1983. – Vol. 54. –P. 520–526.

8. C.B. Duke. Tunneling in solids. / C.B. Duke. – New York: Academic Press, 1969.

9. Елисеев А. А. Функциональные наноматериалы/ Елисеев А. А., Лукашин А. В. – Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2010.

10. Васильев Р. Б. Квантовые точки: синтез, свойства, применение / Васильев Р. Б., Дирин Д. Н. – Москва: МГУ. ФНМ, 2007.

11. Прудников А. В. Получение и физико-химические свойства наноразмерных полупроводниковых наночастиц для оптики и биомедицинских приложений/ Прудников А. В. – Москва: МГУ, 2014.

12. O'Brien J. L. Photonic quantum technologies / O'Brien J. L., Furusawa A., Vučković J. // Nature Photonics. – 2009. – Vol. 3. – №. 12. – P. 687–695.

13. Осин А. Б. Математические модели в молекулярном моделировании / Элькин М. Д., Пулин В. Ф., Осин А. Б. // Вестн. Сарат. гос. техн. ун-та. – 2010. – №. 4. – С. 49.

14. Svitek M. Quantum system modelling / Svitek M. // International Journal of General Systems. – 2008. – Т. 37. – №. 5. – С. 603-626.

15. Базь А. И. Реакции, рассеяние и распады в нерелятивистской квантовой механике./ Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. В. – Москва: Наука, 1971.

16. Калитеевский М.А., Кавокин А.В. // ФТТ. 1995. Т. 37. 10. С. 2721–2728.

17. Борн М. Основы оптики./ Борн М., Вольф Э. – Москва: Наука, 1970.

18. Kavokin A.V. Excitionic light reflection and absorption in semiconductor microcavities at oblique incidence / Kavokin A.V., Kaliteevski M.A.// Sol. St. Commun. –1995. –Vol. 95. –N 12. –P. 859–862.

19. Kavokin A.V. Coupling between one-dimensional excitons and two-dimensional photons: Quantum wires in a microcavity/ Kavokin A.V., Kaliteevski M.A., Vladimirova M.R. // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54. –N 3. –P. 1490–1493.

20. Ivchenko E.L., Kaliteevski M.A., Kavokin A.V., Nesvizhskii A.I. // J. Opt. Soc. Amer. B. –1996. – Vol. 13. – N 5. – P. 1061–1069

21. Bardeen J. Tunneling from a many-particle point of view/ Bardeen J. // Phys. Rev. Lett. –1961.–Vol. 6– P. 5759.

22. Бурштейн Э. Туннельные явления в твердых телах./ Бурштейн Э., Лундквист С. – Москва: Мир, 1973.

23. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики./ Блохинцев Д.И. – Москва: Наука, 1976.

24. Вольф Е.Л. Принципы электронной туннельной спектроскопии./ Вольф Е.Л. – Киев, 1990.

25. Демиховский В.Я. Физика квантовых низкоразмерных структур./ Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А. – Нижний Новгород, 2000.

26. Займан Дж. Принципы теории твердого тела./ Займан Дж. – Москва: Мир, 1996.

27. Ашкрофт Н. Введение в физику твердого тела./ Ашкрофт Н., Мермин Н. – Москва: Мир, 1978.

28. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела./ Киттель Ч. – Москва: Мир, 1978.

29. Мессиа А. Квантовая механика. Том 2. / Мессиа А. – Москва: Наука, 1979.

30. Wolf E. L. Principles of electron tunneling spectroscopy. / Wolf E. L. – Oxford University Press, 2011.

31. Razavy M. Quantum theory of tunneling. / Razavy M. – World Scientific, 2003.

32. Smith F.T. Lifetime matrix in collision theory./ Smith F.T. // Phys. Rev. –1960 – Vol. 118 – P. 349.

33. Wigner E.P. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift/ Wigner E.P.// Phys. Rev. –1955. – Vol. 98– P.145

34. De Carvalho C.A. Time delay/ De Carvalho C.A., Nussenzveig H.M.// Phys. Rep. – 2002. – Vol. 83 – P.145

35. Clerc R. Ph. D. thesis, Institun National Polytechnique de Grenoble. (2001).

36. Duke C.B. Tunneling in solids./ Duke C.B. – Academic Press. New York, 1969.

37. Ashcroft N. Solid State Physics. / Ashcroft N. and Mermin N. – Harcout College Publishers. Fort Worth, TX – 1976.

38. Esaki L. Tunneling in a finite superlattice / Tsu R. and Esaki L // Appl. Phys. Lett. – 1973. –Vol. 22 – P. 562.

39. 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.

40. Ivanov N.A. Transmission of wave packets through open mesoscopic system/ Ivanov N.A., Skalozub V.V. // Problems of Atomic Science and Technology. – 2012. – Vol. 1. – P. 292– 295.

41. Іванов М.А.Час затримки хвильових пакетів при проходженні квантових систем з резонансними рівнями /Іванов М.А, Скалозуб В.В.// Вісник Дніпропетровського університету. – 2010. – вип. 17. – С.34– 39.

42. Ivanov N.A. Time delay of wave packets during their tunnelling through a quantum diode/ Ivanov N.A., Skalozub V.V.// QUANTUM ELECTRON. – 2014. – Vol. 44 (4). – P. 387–391.

43. Ivanov N.A. Tunneling of rectangular wave packages through resonant quantum systems/ Ivanov N.A., Skalozub V.V. // Visnyk Dnipropetrovskoho universytetu. Fizyka. Radioelectronika. – 2014. – Vol. 22. – P.46– 52.

44. Иванов Н.А. Время задержки волновых пакетов при туннелировании квантовых систем/ Иванов Н.А., Скалозуб В.В. // Наноструктурные материалы - 2010. Полупроводниковые наносистемы и наноструктуры. (Киев, Украина, 19-22 октября 2010), Тезисы конференции – С.421

45. 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.

46. 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.

47. 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.

48. Ivanov N.A. Tunneling of a wave-package through an opened quantum system / N.A. Ivanov and V.V. Skalozub // International conference “Quantum Electrodynamics and Statistical Physics”, (Kharkiv, Ukraine, 29 august – 2 september, 2011), Conference Proceedings. – 2011. – P. 132– 134.

49. Lane A. M. R-matrix theory of nuclear reactions / Lane A. M. and Thomas R. G. // Reviews of Modern Physics. – 1958. – T. 30. – №. 2. – C. 257.

50. Делоне Н.Б. Туннельная и надбарьерная ионизация атомов и ионов в поле лазерного излучения/ Делоне Н.Б., Крайнов В.П. // Успехи физ. наук. –1998. –Т. 168. –С. 531.

51. Iogansen L. V. The possibility of resonance transmission of electrons in crystals through a system of barriers / Iogansen L. V. //Soviet Physics JETP. – 1964. – Т. 18. – С. 146

52. Ironside C. N. Investigation into the integration of a resonant tunnelling diode and an optical communications laser: Model and experiment / Slight T. J., Ironside C. N. //Quantum Electronics, IEEE Journal of. – 2007. – Т. 43. – №. 7. – С. 580-587

53. Gennser U. et al. Resonant tunneling of holes through silicon barriers //Journal of Vacuum Science & Technology B. – 1990. – Т. 8. – №. 2. – С. 210-213

54. Davies John H. The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction. — 6th reprint. — Cambridge University Press , 2006.

55. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. / Блохинцев Д. И. – Москва:Наука , 1976.

56. Wulf U., Skalozub V. V. Pulse propagation in resonant tunneling //Physical Review B. – 2005. – Т. 72. – №. 16. – С. 165331.

57. Гамов Г. А. Строение атомного ядра и радиоактивность / Гамов Г. А. – Москва-Ленинград: Гостехтеорфизиздат, 1932.

58. Fowler R. H., Nordheim L. Electron emission in intense electric fields //Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – The Royal Society, 1928. – Т. 119. – №. 781. – С. 173-181.

59. David Bohm. Quantum Theory/ David Bohm. – Prentice-Hall. New York, 1951.

60. Aharonov Y., Bohm D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory //Physical Review. – 1959. – Т. 115. – №. 3. – С. 485

61. Hartman T. E. Tunneling of a wave packet //Journal of Applied Physics. – 1962. – Т. 33. – №. 12. – С. 3427-3433.

62. Nimtz G. Tunneling confronts special relativity //Foundations of Physics. – 2011. – Т. 41. – №. 7. – С. 1193-1199.

63. Carôt A., Aichmann H., Nimtz G. Giant negative group time delay by microwave adaptors //EPL (Europhysics Letters). – 2012. – Т. 98. – №. 6. – С. 64002.

64. Алексеев Е.Р. Решение задач вычислительной математики в пакетах Mathcad 12, MATLAB 7, Maple 9./ Алексеев Е.Р., Чеснокова О. В. – «НТ Пресс», 2006.

65. Дьяконов В. П. Mathematica 5.1/5.2/6.0. Программирование и математические вычисления. / Дьяконов В. П. – ДМК пресс., 2008.

66. Бхаттачария Р.Н. Аппроксимация нормальным распределением и асимтотические разложения/ Бхаттачария Р.Н., Ранга Рао Р. – Москва: Наука, 2982.

67. де Брёйн Н.Г. Асимптотические методы в анализе./ де Брёйн Н.Г. – Москва: Издательство иностранной литературы, 1961.

68. Mehra J., Rechenberg H. The Historical Development of Quantum Theory. Vol. 6: The Completion of Quantum Mechanics 1926–1941. Part 1: The Probabilistic Interpretation and the Empirical and Mathematical Foundation of Quantum Mechanics, 1926-1936 //Springer-Verlag, New York, 2000.

69. Wheeler J. A. On the mathematical description of light nuclei by the method of resonating group structure / Wheeler J. A. //Physical Review. – 1937. – Т. 52. – №. 11. – С. 1107.

70. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Издание 4-е. — Москва:Наука. , 1989.

71. Polyanin A. D., Zaitsev V. F. Handbook of exact solutions for ordinary differential equations //Boca Raton: CRC Press,| c1995. – 1995. – Т. 1.

72. Eyges L. The classical electromagnetic field./ Eyges L. — Courier Corporation, 1980.

73. Cole K. D. Methods for obtaining Green's functions, Heat Conduction Using Green's Functions, Taylor and Francis/ K. D. Cole, J. V. Beck, A. Haji-Sheikh, and B. Litkouhi //, 2011, p. 101–148.

74. Лебедев А. И. Физика полупроводниковых приборов / Лебедев А. И. – Москва:Физматлит, 2008.

75. Donald G. Fink. Electronic Engineers Handbook/ Donald G. Fink – McGraw Hill. New York, 1975.

76. Екимов А. И.Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников / Екимов А. И., Онущенко А. А. // Письма в ЖЭТФ. – 1981. – Т. 34. – №. 6. – С. 363-366.

77. Bimberg D. Quantum dot heterostructures./ Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N. N. – John Wiley & Sons, 1999.

78. Hauge E. H. Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers / Hauge E. H., Falck J. P., Fjeldly T. A. // Physical Review B. – 1987. – Т. 36. – №. 8. – С. 4203.

79. Teranishi N. Tunneling by an electron packet with an initially sharp wavefront / Teranishi N., Kriman A. M., Ferry D. K. //Superlattices and Microstructures. – 1987. – Т. 3. – №. 5. – С. 509-514.

80. Andreata M. A. The reflection of narrow slow quantum packets from mirrors / Andreata M. A., Dodonov V. V. //Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2002. – Т. 35. – №. 40. – С. 8373.

81. Lozovik Y. Transmission time of wave packets through tunneling barriers / Lozovik Y., Filinov A. //arXiv preprint quant-ph/9905047. – 1999.

82. Gong J. Tunneling time of electronic wave packet through a parabolic quantum well with double barrier / Gong J., Liang X. X., Ban S. L.//Physica status solidi (b). – 2007. – Т. 244. – №. 6. – С. 2064-2071.

83. Федорюк М. В. Метод перевала./ Федорюк М. В. – Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1977.

84. Свешников А. Г., Тихонов А. Н. Теория функций комплексной переменной. – Москва: Физматлит, 2001.

85. Lippmann B. A. Variational principles for scattering processes. I / Lippmann B. A., Schwinger J. // Physical Review. – 1950. – Т. 79. – №. 3. – С. 469.

86. Weinberg S. The quantum theory of fields. – Cambridge university press, 1996.

87. Shankar R. Principles of Quantum Mechanics. — 2nd. — Kluwer Academic/ Plenum Publishers, 1994. — P. 143.

88. Градштейн И. С.Таблицы интегралов сумм рядов и призведений./ Градштейн И. С., Рыжик И. М. – Москва: Физматгиз, 1963.

89. Фок В. А. Начала квантовой механики./ Фок В. А. — Москва: Наука , 1976.

90. Березин Ф. А. Уравнение Шрёдингера. / Ф. А. Березин, М. А. Шубин. — Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1983.