

## ФИЗИКА

УДК 530.145

### О РЕШЕНИИ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ МЕТОДОМ КАНТОРОВИЧА – ПРИВЕДЕНИЕ К ОБЫКНОВЕННЫМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ УРАВНЕНИЯМ

В.Л. Дербов, В.В. Серов, С.И. Виноцкий\*, А.А. Гусев\*,  
О. Чулуунбаатар\*\*\*, Э.М. Казарян\*\*\*, А.А. Саркисян\*\*\*

Саратовский государственный университет

\* Объединённый институт ядерных исследований, Дубна

\*\* Международный университет природы общества и человека «Дубна», Дубна

\*\*\* Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

E-mail: derbovvl@gmail.com

Представлена вычислительная схема решения эллиптических задач методом Канторовича для примесных состояний в моделях квантовых точек, квантовых проволок и ям в приближении эффективной массы с ограничивающими потенциалами гармонического осциллятора и бесконечно высокой стенки. Скорость сходимости метода и эффективность предлагаемого комплекса программ, реализующих метод конечных элементов, демонстрируется примерами вычисления спектральных характеристик моделей, а также новых эффектов резонансного прохождения и полного отражения для кулоновского рассеяния, индуцированных аксиальным однородным магнитным полем, кристаллической решеткой или квантовой проволокой.

**Ключевые слова:** эллиптические краевые задачи, метод Канторовича, примесные состояния, квантовые наноструктуры.

**On Solving the Low-Dimensional Boundary Value Problems of Quantum Mechanics by Kantorovich Method – Reduction to Ordinary Differential Equations**

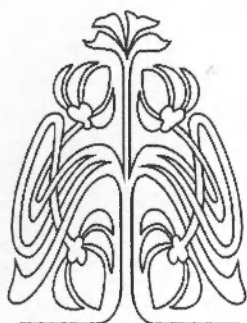
V.L. Derbov, V.V. Serov, S.I. Vinitsky, A.A. Gusev,  
O. Chuluunbaatar, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan

The calculation scheme for solving the elliptic boundary problem by Kantorovich method for impurity states in models of quantum dots, wires and wells in the effective mass approximation with parabolic confinement potential of harmonic oscillator and infinitely-high walls is presented. The rate of convergence of the method and the efficiency of the proposed program complex, realized by the finite element method, is demonstrated on examples of calculation of spectral characteristics of the models and new effects of resonance transmission and total reflection for the Coulomb scattering, induced by axial homogeneous magnetic field, crystal lattice, or quantum wire.

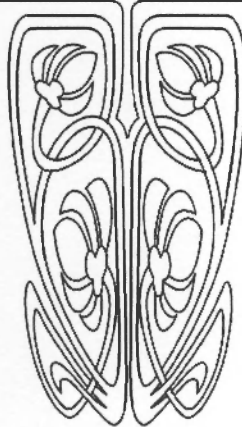
**Key words:** elliptic boundary problem, Kantorovich method, impurity states, quantum nanostructures.

#### Введение

Начиная с работ Борна и Оппенгеймера адиабатический метод применяется для решения различных задач физики. Используется идея приближенного разделения «быстрых»  $\vec{x}_f$  и «медленных»  $\vec{x}_s$  переменных в гамильтониане  $H \equiv H(\vec{x}_f, \vec{x}_s)$  исходной системы, представимом в виде суммы  $H(\vec{x}_f, \vec{x}_s) = H_f(\vec{x}_f; \vec{x}_s) + H_s(\vec{x}_s)$  гамильтонианов быстрой и медленной подсистем с характеристическими собственными энергиями, подчинёнными условию  $|\varepsilon_f^{(min)}| = \hbar\omega_f > |\varepsilon_s^{(min)}| = \hbar\omega_s$  [1]. В общем случае волновая функция ищется в виде адиабатического разложения



НАУЧНЫЙ  
ОТДЕЛ





$$\langle \bar{x}_f, \bar{x}_s | n_k \rangle = \sum_{n_{k+1}} \langle \bar{x}_f | n_{k+1}, \bar{x}_s \rangle \langle \bar{x}_s, n_{k+1} | n_k \rangle,$$

по параметрическим базисным функциям  $\langle \bar{x}_f | n_{k+1}, \bar{x}_s \rangle$  быстрой подсистемы с неизвестными вектор-функциями  $\langle \bar{x}_s, n_{k+1} | n_k \rangle$  медленной подсистемы. Усреднение исходного уравнения системы с гамильтонианом  $H = H(\bar{x}_f, \bar{x}_s)$  по базисным функциям приводит к системе уравнений по переменным  $x_s$  относительно неизвестных вектор-функций  $\langle \bar{x}_s, n_{k+1} | n_k \rangle$  медленной подсистемы. В математике сходный метод – приведение к обыкновенным дифференциальным уравнениям для решения двумерных эллиптических краевых задач, который занимает промежуточное положение между точным решением задачи и методом Релея – был предложен в 1935 г. Л.В. Канторовичем [2]. Построение подходящих базисных функций, зависящих от второй переменной как от параметра, а также решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, в этом методе предполагает, прежде всего, их подчинение краевым условиям исходной задачи, что и обеспечивает корректное строение приближенного решения. Вычислительная схема и применение метода для решения задачи с краевыми условиями третьего рода даны в [3].

Многошаговое обобщение адиабатического метода, или метода Канторовича, сформулировано в работе [4]. Все независимые переменные  $\bar{x} \in \mathbf{X}$  подобласти координатного пространства  $\mathbf{X} \subset \mathbf{R}^N$  трактуются как некоторый набор динамически упорядоченных от быстрых к медленным переменных  $\bar{x} \mapsto \{\bar{x}_f, \bar{x}_s\}^T = \{x_N, x_{N-1}, \dots, x_1\}^T$  в соответствии с набором параметрических гамильтонианов подсистем  $H_i = H_i(x_i, x_{i-1}, \dots, x_1)$ , составляющих исходный гамильтониан  $H = \sum_{i=1}^N H_{N+1-i}$  – дифференциальный оператор эллиптического типа. Применение метода пошагового усреднения исходного га-

мильтониана  $H$  позволяет исключать независимые более быстрые переменные  $(x_N, \dots, x_2)$  последовательно, что соответствует многошаговому обобщению адиабатического метода, или метода Канторовича:

$$\begin{aligned} \psi_{n_1}(\bar{x}) &= \psi_{n_1}^{(1)}(x_N, \dots, x_1) = \\ &= \sum_{n_2} \psi_{n_2}^{(2)}(x_N, \dots, x_2; x_1) \chi_{n_2, n_1}^{(1)}(x_1) = \\ &= \sum_{n_2 \dots n_N} \psi_{n_N}^{(N)}(x_N; x_{N-1}, \dots, x_1) \dots \chi_{n_k, n_k}^{(k)} \times \\ &\times (x_k; x_{k-1}, \dots, x_1) \dots \chi_{n_2, n_2}^{(2)}(x_2; x_1) \chi_{n_2, n_1}^{(1)}(x_1). \end{aligned}$$

Оптимизация скорости сходимости метода возможна при подходящем выборе упорядоченного набора гамильтонианов подсистем, характеристические собственные значения которых подчиняются условиям  $|\varepsilon_N^{(\min)}| > |\varepsilon_{N-1}^{(\min)}| > \dots > |\varepsilon_1^{(\min)}|$ .

В качестве первого шага в реализации метода ниже представлена вычислительная схема решения двумерных эллиптических задач для примесных состояний в квантово-размерных моделях квантовых точек, квантовых проволок (КПр) и квантовых ям (КЯ) с ограничивающими потенциалами гармонического осциллятора и бесконечно высокой стенки [5, 6]. Скорость сходимости метода и эффективность предлагаемого пользователям комплекса программ ODPEVP [7] и KANTBP [8], реализующих метод конечных элементов [9], демонстрируется примерами вычисления спектральных характеристик рассмотренных моделей и сравнением приближенных решений в зависимости от выбора систем координат, гамильтонианов подсистем, быстрых и медленных переменных, базисных функций и краевых условий. Схематическое представление полупроводниковых наноструктур: объемный образец, квантовые ямы, проволоки и точки и соответствующие им зависимости плотности состояний (ПС) от энергии  $E$  даны на рис. 1.

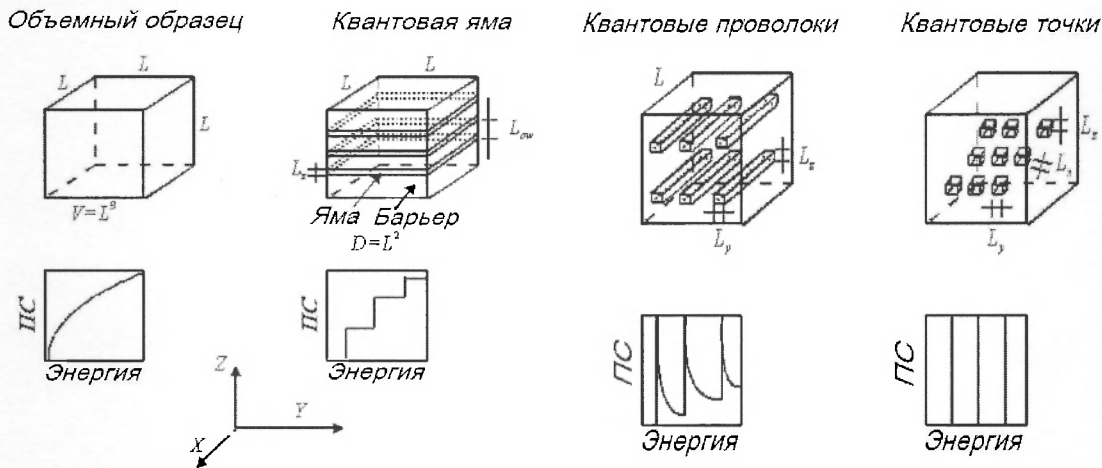


Рис. 1. Схематическое представление полупроводниковых наноструктур: объемный образец, квантовые ямы, проволоки и точки и соответствующие им зависимости плотности состояний от энергии  $E$

**Вычислительная схема решения двумерных краевых задач**

В приближении эффективной массы<sup>1</sup> уравнение Шредингера для примесного электрона, находящегося под действием магнитного поля, квантовой точки, квантовой проволоки [10] и квантовой ямы [11, 12], имеет вид

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \left( \hat{p} - \frac{q_1}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) - \frac{q}{\kappa |\vec{r}_c|} \right\} \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

где  $E$  – энергия системы,  $|\vec{r}_c| = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_c)^2}$ ,  $q_1$  – кулоновский заряд электрона  $q_1 = -e$  (позитрона  $q_1 = +e$ ),  $q_2e$  – кулоновский заряд примесного центра,  $z_c \in [-z_0/2, z_0/2]$  – сдвиг заряда  $q_2e$  по оси  $z$  для КЯ ( $z_c = 0$  для КТ и КПр),  $q = -q_1 q_2 e^2$ ,  $\kappa$  – диэлектрическая проницаемость (для GaAs  $q = 1$ ,  $\kappa = 13.18$ ),  $\mu = \beta m_e$  – эффективная масса электрона (для GaAs  $\beta = 0.067$ ),  $U(\vec{r})$  – параболический потенциал с частотой  $\omega = \gamma_{r_0} \frac{\hbar}{\mu r_0^2}$ ,  $\gamma_{r_0} \sim \pi^2/3$  – подгоночный параметр (модель А):

$$U(\vec{r}) \equiv U^A(\vec{r}) = \mu \omega^2 (\zeta_1 (x^2 + y^2) + \zeta_3 z^2) / 2,$$

<sup>1</sup> Сравнение теории с экспериментом показывает, что если толщина образца в направлении квантования содержит более 10-ти кристаллических слоев, т.е. начиная от 30-ти, 40-ка ангстрем и выше, то можно использовать приближение эффективной массы [5].

$r_0 = \sqrt{\zeta_1 (x_0^2 + y_0^2) + \zeta_3 z_0^2}$  – радиус КТ ( $\zeta_1 = 1$ ,  $\zeta_3 = 1$ ), КПр ( $\zeta_1 = 1$ ,  $\zeta_3 = 0$ ) и КЯ ( $\zeta_1 = 0$ ,  $\zeta_3 = 1$ ). Для сравнения используем модели КТ, КПр и КЯ ( $\zeta_3 = 1/2$ ) с потенциалом  $U(\vec{r})$  (модель Б):

$$U(\vec{r}) = U^B(\vec{r}) = \{0, 0 \leq |\vec{r}| < r_0; +\infty, |\vec{r}| \geq r_0\},$$

$$U(z) \equiv U^B(z) = \{0, |z| < z_0/2; +\infty, |z| \geq z_0/2\}.$$

Направление оси  $z$  выберем вдоль магнитного поля  $\vec{H}$  с вектор-потенциалом  $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{r}$ , используем приведенные атомные единицы ( $a_B^* = 102 \text{ \AA}$ ,  $E_R^* = Ry^* = 5.2 \text{ мэВ}$ ) и безразмерный параметр  $\gamma^* = H/H_0^*$ , где  $H_0^* = 6 \text{ Тл}$  [6]. Уравнение (1) при фиксированных значениях магнитного квантового числа  $m = 0, \pm 1, \dots$  имеет вид

$$\left( \frac{1}{g_{3s}(x_s)} \hat{H}_2(x_f; x_s) + \hat{H}_1(x_s) - 2E \right) \Psi(x_f, x_s) = 0, \quad (2)$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{1}{g_{1f}(x_f)} \frac{\partial}{\partial x_f} g_{2f}(x_f) \frac{\partial}{\partial x_f} + \hat{V}_f(x_f) + \hat{V}_B(x_f, x_s),$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{g_{1s}(x_s)} \frac{\partial}{\partial x_s} g_{2s}(x_s) \frac{\partial}{\partial x_s} + \hat{V}_s(x_s),$$

где  $2E = p_f^2 + p_s^2$ ,  $p_f^2$  и  $p_s^2$  – асимптотические значения квадратов импульсов гамильтонианов быстрой  $\hat{H}_2 \equiv \hat{H}_2(x_f; x_s) = g_{3s}(x_s) H_2(x_f; x_s)$



и медленной  $\hat{H}_1 \equiv \hat{H}_1(x_s) = H_1(x_s)$  подсистем,  $\hat{V}_{fs}(x_f, x_s) = g_{3s}(x_s)V_{fs}(x_f, x_s)$  – кулоновский потенциал в цилиндрических (ЦК) или сферических (СК) координатах:

$$V_{fs}(x_f, x_s) = -\frac{q}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_c)^2}} - \frac{q}{r_c}$$

Для КТ движение ограничено по поперечным и продольной переменным, а в КПр – только по поперечным, поэтому в качестве быстрых и медленных переменных в ЦК выбраны соответственно:  $x_f = \rho$  и  $x_s = z$ , а в СК –  $x_f = \eta$  и  $x_s = r$ . Для КЯ движение ограничено только по продольной переменной, поэтому быстрые и медленные переменные в ЦК меняются местами, т.е.  $x_f = z$  и  $x_s = \rho$ , а в СК остаются теми же,  $x_f = \eta$  и  $x_s = r$  (рис.2).

При  $z_c = 0$  гамильтониан коммутирует с оператором  $z$ -чётности ( $z \rightarrow -z$  или  $\eta \rightarrow -\eta$ ), решения разделяются на чётные ( $\sigma = +1$ ) и нечётные ( $\sigma = -1$ ), а при  $z_c \neq 0$  не имеют определённой чётности ( $\sigma = 0$ ). В таблице при-

ведены параметры коэффициентов и потенциалов, входящих в уравнение (2), и краевые условия задач (4), (5) для КТ, КПр и КЯ в ЦК и СК. В таблице использованы следующие обозначения:  $V_* = \frac{m^2}{\rho^2} - \text{sign}(q_1)\gamma m + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2$ , где  $\text{sign}(q_1) = -1$  для электрона и  $\text{sign}(q_1) = +1$  для позитрона (дырки),

$$V_{**} = \frac{m^2}{1-\eta_c^2} - 2\text{sign}(q_1)p\gamma m + (\omega^2 + p^2)(1-\eta_c^2)$$

$$\text{при } p = \gamma r_c^2/2, V_{***} = \frac{m^2}{1-\eta_c^2} - c^2(1-\eta_c^2) - b\eta_c + f$$

$$\text{при } c = \omega r_c^2, b = -2\omega z_c r_c^3, f = (\omega z_c r_c^2); \text{ Д –}$$

граничное условие Дирихле ( $\Phi(x_f^{\text{min}}, x_s) = 0$ ,

$$\Phi(x_f^{\text{max}}, x_s) = 0, \chi^{(i)}(x_s^{\text{min}}) = 0 \text{ или } \chi^{(i)}(x_s^{\text{max}}) = 0),$$

Н – граничное условие типа Неймана

$$\left( \lim_{x_f \rightarrow x_f^{\text{min}}} g_{2f}(x_f) \frac{d\Phi(x_f, x_s)}{dx_f} = 0, \right.$$

$$\left. \lim_{x_f \rightarrow x_f^{\text{max}}} g_{2f}(x_f) \frac{d\Phi(x_f, x_s)}{dx_f} = 0 \right.$$

или

$$\lim_{x_s \rightarrow x_s^{\text{min}}} g_{2s}(x_s) \frac{d\chi^{(i)}(x_s)}{dx_s} = 0.$$

Параметры коэффициентов и потенциалов, входящих в (2) и краевые условия задач (4), (5) для КТ, КПр и КЯ, в ЦК и СК (в приведённых единицах)

Параметр	ЦК			СК		
	КТ	КПр	КЯ	КТ	КПр	КЯ ( $\gamma = 0$ )
$x_f$	$\rho$	$\rho$	$z$	$\eta_c$	$\eta_c$	$\eta_c$
$x_s$	$Z$	$z$	$\rho$	$r_c$	$r_c$	$r_c$
$g_{1f}$	$\rho$	$\rho$	1	1	1	1
$g_{2f}$	$\rho$	$\rho$	1	$1-\eta_c^2$	$1-\eta_c^2$	$1-\eta_c^2$
$g_{1s}$	1	1	$\rho$	$r_c^2$	$r_c^2$	$r_c^2$
$g_{2s}$	1	1	$\rho$	$r_c^2$	$r_c^2$	$r_c^2$
$g_{3s}$	1	1	1	$r_c^2$	$r_c^2$	$r_c^2$
<b>Модель А</b>						
$V_f(x_f)$	$V_* + \omega^2\rho^2$	$V_* + \omega^2\rho^2$	$\omega^2 z^2$	$V_{**}$	$V_{**}$	$V_{***}$
$x_f \rightarrow x_f^{\text{min}}$	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Д	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )
$x_f \rightarrow x_f^{\text{max}}$	Д	Д	Д	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )
$V_s(x_s)$	$\omega^2 z^2$	0	$V_*$	$\omega^2 r_c^4$	0	0
$x_s \rightarrow x_s^{\text{min}}$	Д	Д	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н	Н	Н
$x_s \rightarrow x_s^{\text{max}}$	Д	Д	Д	Д	Д	Д



Окончание таблицы

Параметр	ЦК			СК		
	КТ	КПр	КЯ	КТ	КПр	КЯ ( $\gamma = 0$ )
<b>Модель Б</b>						
$V_f(x_f)$	$V_*$	$V_*$	0	$V_{**}$	$V_{**}$	
$x_f \rightarrow x_f^{\min}$	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Д	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	
$x_f \rightarrow x_f^{\max}$	Д	Д	Д	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	
$V_s(x_s)$	0	0	$V_*$	0	0	
$x_s \rightarrow x_s^{\min}$	Д	Д	Н ( $m = 0$ ) Д ( $m \neq 0$ )	Н	Н	
$x_s \rightarrow x_s^{\max}$	Д	Д	Д	Д	Д	

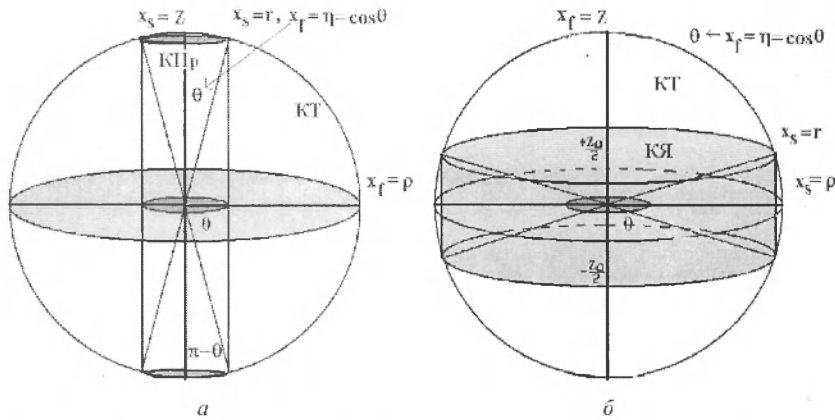


Рис. 2. Системы цилиндрических  $(z, \rho, \varphi)$  и сферических  $(r, \eta = \cos \theta, \varphi)$  координат (при  $z_c = 0$ ) для КТ, КПр (отличается поворотом вокруг оси  $y$  на  $\pi/2$  от рис.1) и КЯ и их соответствие быстрым  $x_f$  и медленным  $x_s$  переменным:  $a - x_f = \rho, \varphi; x_s = z$  для КПр,  $x_f = \eta, \varphi; x_s = r$  для КПр, КТ;  $b - x_f = z, \varphi; x_s = \rho$  для КЯ и  $x_f = \eta, \varphi; x_s = r$  для КЯ, КТ

Решение задачи (2) ищем в виде разложения

$$\Psi(x_f, x_s) = \sum_{i=1}^{N_m} \Psi_i^{Em}(x_f, x_s) \bar{\Phi}_i^m(p_f),$$

$$\Psi_i^{Em}(x_f, x_s) = \sum_{j=1}^{J_{\max}} \Phi_j^m(x_f; x_s) \chi_j^{(mi)}(x_s, E). \quad (3)$$

по собственным функциям параметрической задачи для быстрой подсистемы

$$\{\hat{H}_2(x_f; x_s) - \hat{E}(x_s)\} \hat{\Phi}_i(x_f; x_s) = 0, \quad (4)$$

которые подчиняются краевым условиям в граничных точках интервала

$$\lim_{x_f \rightarrow x_f'} \left( N_f^{(m)} g_{2f}(x_f) \frac{d\Phi_f^m(x_f; x_s)}{dx_f} + D_f^{(m)} \Phi_f^m(x_f; x_s) \right) = 0,$$

$$x_f' = x_f^{\min}, x_f^{\max}$$

где  $N_f^{(m)} = 1, D_f^{(m)} = 0$  при  $m = 0, \sigma = +1$  или  $\sigma = 0, N_f^{(m)} = 0, D_f^{(m)} = 1$  при  $m = 0, \sigma = -1$  или  $m \neq 0$  (см. таблицу), и удовлетворяют условию ортонормировки

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \int_{x_f^{\min}}^{x_f^{\max}} \Phi_i(x_f; x_s) \Phi_j(x_f; x_s) g_{1f}(x_f) dx_f = \delta_{ij}. \quad (5)$$



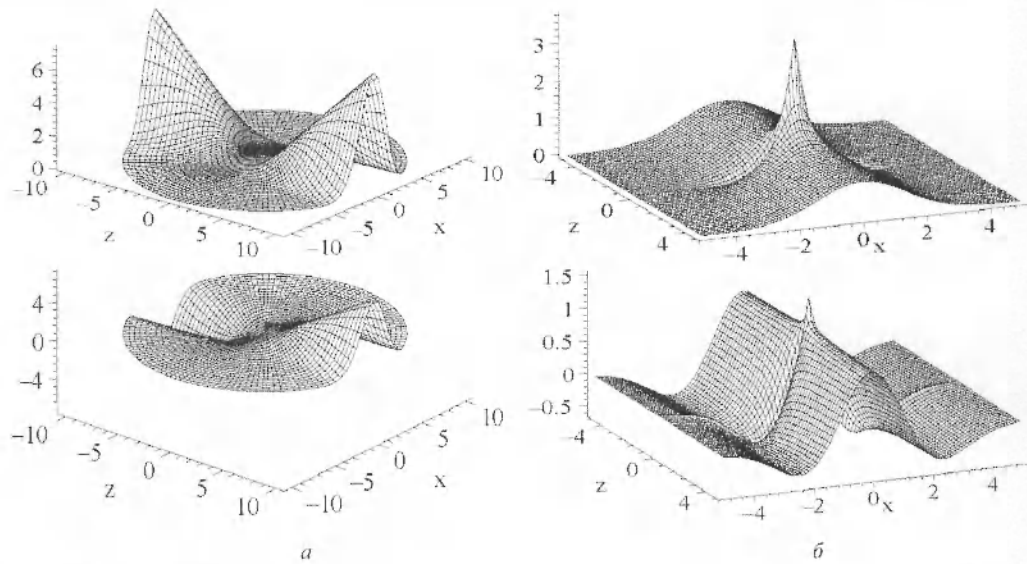


Рис. 3. Модели А КПр и КТ при  $\omega = 0$ ,  $\gamma = 1$  и  $m = 0$ . Профили в плоскости  $xz$  базисных функций  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$ :  $a$  – угловые сплюснутые сфероидальные функции в СК,  $b$  – базисные функции в ЦК

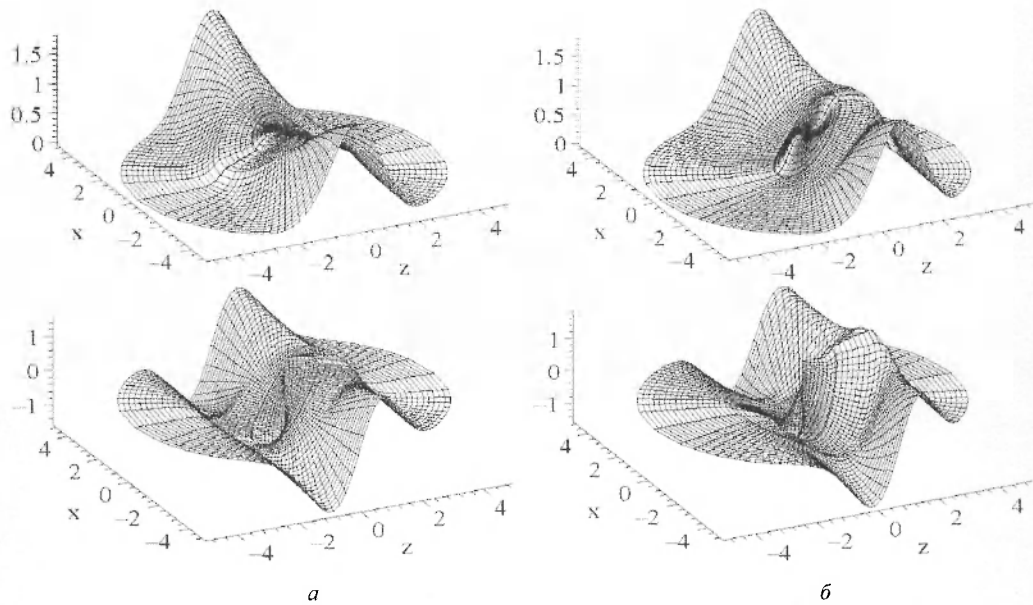


Рис. 4. Модель А КЯ при  $\gamma^* = 0$ ,  $\omega = 3$  и  $m = 0$ . Профили в плоскости  $xz$  базисных функций  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$ :  $a$  – угловые вытянутые сфероидальные функции при  $z_c = 0$ ;  $b$  – модифицированные угловые вытянутые сфероидальные функции при  $z_c = 0.5$

Здесь  $\hat{E}_1(x_s) < \dots < \hat{E}_{j_{\max}}(x_s) < \dots$  – искомый набор вещественных собственных значений (термов),  $\bar{\Phi}_j^m(p_f) = FT(\Phi(x_f; x_s \rightarrow \infty))$ , где  $FT$  – преобразование Фурье. Решения задачи (4), (5) вычисляются с использованием программы ODPEVP [7].

На рис. 3–6 показаны базисные функции КТ, КПр и КЯ для моделей А и Б в СК и ЦК.

Виден сдвиг максимума  $z_{\max} = 0.4$  базисных функций, соответствующий сдвигу кулоновского центра  $z_c = 0.4$  для модели А – КЯ с параболическим ограничивающим потенциалом, и разделение базисных функций по четности при  $z_c = 0$  как для КЯ, так и для КТ и КПр.

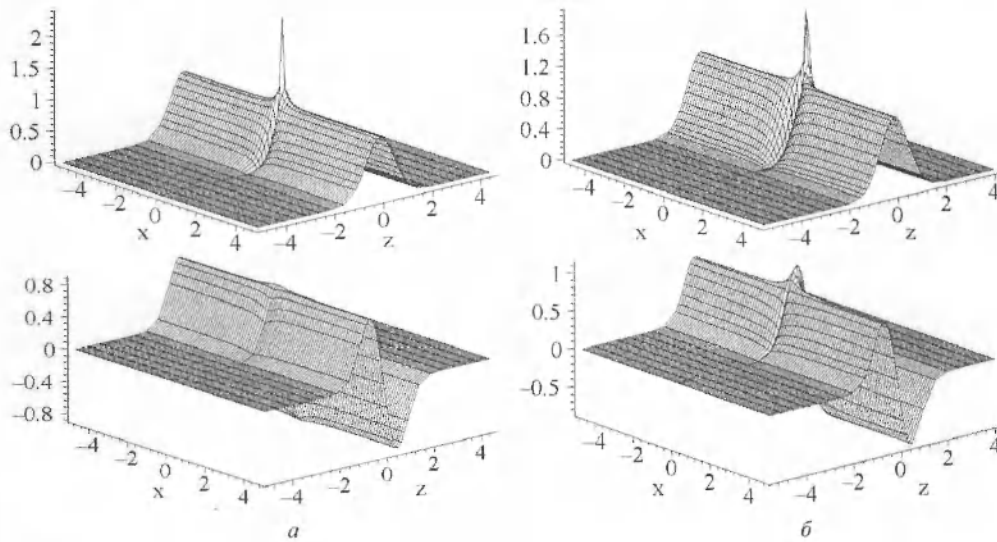


Рис. 5. Модель А КЯ при  $\gamma = 0$ ,  $\omega = 3$  и  $m = 0$ . Профили в плоскости  $xz$  базисных функций  $\Phi_1, \Phi_2$ , являющиеся решениями параметрической задачи (4) в цилиндрических координатах: *a* – четные и нечетные решения,  $z_c = 0$ ; *b* – решения, не имеющие определенной чётности,  $z_c = 0.4$

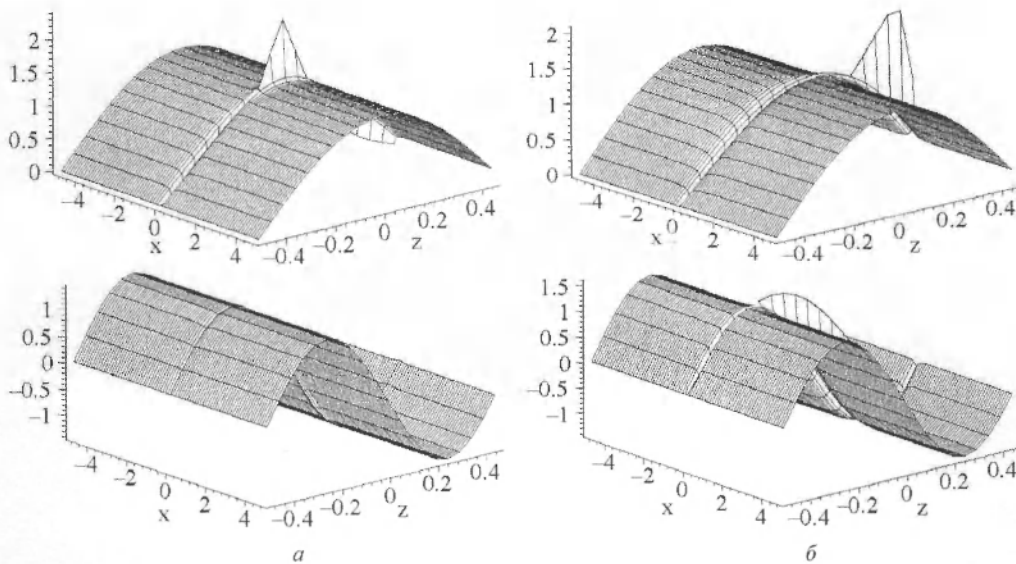


Рис. 6. Модель Б КЯ при  $\gamma = 0$ ,  $L = 1$  и  $m = 0$ . Профили в плоскости  $xz$  базисных функций  $\Phi_1, \Phi_2$  – решений, являющихся решениями параметрической задачи (4) в цилиндрических координатах: *a* – четные и нечетные решения,  $z_c = 0$ , *b* – решения, не имеющие определенной чётности  $z_c = 0.4$

Подставляя разложение (3) в уравнение (2) с учетом (4) и (5), получаем систему ОДУ для медленной подсистемы относительно неизвестных вектор-функций

$$\chi^{(i)}(x_s, E) \equiv \chi^{(i)}(x_s) = (\chi_1^{(i)}(x_s), \dots, \chi_{j_{\max}}^{(i)}(x_s))^T : \\ \mathbf{H} \chi^{(i)}(x_s) = 2E \mathbf{I} \chi^{(i)}(x_s), \quad (6)$$

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{g_{1s}(x_s)} \mathbf{I} \frac{d}{dx_s} g_{2s}(x_s) \frac{d}{dx_s} + \hat{V}_s(x_s) \mathbf{I} + \mathbf{U}(x_s) +$$

$$+ \frac{g_{2s}(x_s)}{g_{1s}(x_s)} \mathbf{Q}(x_s) \frac{d}{dx_s} + \frac{1}{g_{1s}(x_s)} \frac{dg_{2s}(x_s)}{dx_s} \mathbf{Q}(z)$$

Здесь  $\mathbf{U}(x_s) = \mathbf{U}^T(x_s)$  и  $\mathbf{Q}(x_s) = -\mathbf{Q}^T(x_s)$  – матрицы размерности  $j_{\max} \times j_{\max}$ :

$$U_{ii}(x_s) = \frac{1}{g_{3s}(x_s)} \hat{E}_i(x_s) \delta_{ii} + \frac{g_{2s}(x_s)}{g_{1s}(x_s)} W_{ii}(x_s),$$

$$W_{ij}(x_s) = \int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} \frac{\partial \Phi_i(x_f; x_s)}{\partial x_f} \frac{\partial \Phi_j(x_f; x_s)}{\partial x_f} g_{1s}(x_s) dx_s,$$



$$Q_{ij}(x_s) = - \int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} \Phi_i(x_f; x_s) \frac{\partial \Phi_j(x_s; x_c)}{\partial x_f} g_{js}(x_s) dx_s,$$

вычисляются при помощи программы ODPEVP [7]. Решения  $\chi^{(v)}(x_s)$  дискретного спектра:  $2E_1 < 2E_2 < \dots < 2E_v < \dots < 2U_{11}(x_s^{\max})$ , подчиняющиеся краевым условиям (см. таблицу) и условиям ортонормировки

$$\int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} (\chi^{(v)}(x_s))^T \chi^{(v)}(x_s) g_{1s}(x_s) dx_s = \delta_{v,v'}, \quad (7)$$

вычисляются при помощи программы KANTBP [8]. Для многоканальной задачи рассеяния число открытых каналов  $N_o = \max j \leq j_{\max}$  в (3) определяется условием для непрерывного спектра значений

$$2E > \lim_{x_s^{\max} \rightarrow \infty} U_{jj}(x_s^{\max}),$$

если  $\lim_{x_s^{\max} \rightarrow \infty} g_{2s}(x_s^{\max})/g_{1s}(x_s^{\max}) = \text{const}$ , а нормировка решения  $\mathbf{F}(x_s) = \{\chi_{i_c}(x_s)\}_{i_c=1}^{N_o}$ :

$$\mathbf{F}(x_s^{\max}) = \mathbf{F}_{reg}^{as}(x_s^{\max}) + \mathbf{F}_{irr}^{as}(x_s^{\max})\mathbf{K}, \quad (8)$$

где  $\mathbf{K}$  – искомая матрица реакции размерностью  $N_o \times N_o$ , а  $\mathbf{F}_{reg}^{as}(x_s)$  и  $\mathbf{F}_{irr}^{as}(x_s^{\max})$  – матрицы размерностью  $j_{\max} \times N_o$  асимптотик регулярных и нерегулярных решений уравнения (6) на интервале  $(x_s^{\max}, +\infty)$ , построенные с учетом диагональной матрицы кулоновских фазовых сдвигов  $\delta^c = \{\delta_{i_c}^c\}_{i_c=1}^{N_o}$ , в [11, 12]. Решения непрерывного спектра подчиняются краевым условиям для КЯ в ЦК,  $x_s = \rho$ , или СК [11],  $x_s = r$ , и для КПр в ЦК,  $x_s = z$ , или СК [12],  $x_s = r$ :

$$\lim_{x_s \rightarrow x_s^{\max} = 0} g_{2s}(x_s) \frac{d\mathbf{F}(x_s)}{dx_s} = 0, \\ \frac{d\mathbf{F}(x_s^{\max})}{dx_s} = \mathbf{R}(x_s^{\max})\mathbf{F}(x_s^{\max}), \quad (9)$$

где  $\mathbf{R}(x_s^{\max})$  – неизвестная несимметричная матрица реакции размерностью  $j_{\max} \times j_{\max}$ , через которую выражается искомая короткодействующая симметричная  $\mathbf{K}$ -матрица, вычисляемые при помощи программы KANTBP [8]. Решения задачи (6), (9), дополненные асимптотиками (8), удовлетворяют соотношениям

$$\int_0^{+\infty} (\chi^{(i)}(x_s, E))^T \chi^{(i)}(x_s, E) g_{1s}(x_s) dx_s = \delta(E - E') \delta_{i,i'},$$

$$i', i = 1, \dots, N_o.$$

Короткодействующая матрица рассеяния  $\mathbf{S}$  определяется через  $\mathbf{K}$ -матрицу:

$$\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}_{oo}, \quad \mathbf{K} = i(\mathbf{I}_{oo} + \mathbf{S})^{-1}(\mathbf{I}_{oo} - \mathbf{S}), \\ \mathbf{S} = (\mathbf{I}_{oo} + i\mathbf{K})(\mathbf{I}_{oo} - i\mathbf{K})^{-1}. \quad (10)$$

Здесь  $\mathbf{S} = (\mathbf{I}_{oo} + i\mathbf{K})(\mathbf{I}_{oo} - i\mathbf{K})^{-1}$  – симметричная унитарная короткодействующая матрица рассеяния  $\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}_{oo}$  определяет искомую  $\check{\mathbf{S}} = \exp(i\delta^c) \mathbf{S} \exp(i\delta^c)$ . Для аксиально симметричной КПр, матрицы амплитуд прохождения  $\hat{\mathbf{T}}$  и отражения  $\hat{\mathbf{R}}$ , блоки полной матрицы рассеяния [12]

$$\hat{\mathbf{S}}^\dagger \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{S}}^\dagger = \mathbf{I}_{oo}, \quad \hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{T}} & \hat{\mathbf{R}} \\ \hat{\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{T}} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

определяются соотношениями

$$\hat{\mathbf{T}}^\dagger \hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{R}}^\dagger \hat{\mathbf{R}} = \mathbf{I}_{oo}, \quad \hat{\mathbf{T}} = \frac{1}{2}(-\check{\mathbf{S}}_{+1} + \check{\mathbf{S}}_{-1}), \\ \hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{2}(-\check{\mathbf{S}}_{+1} - \check{\mathbf{S}}_{-1}), \quad (12)$$

где дальнедействующая  $\check{\mathbf{S}}_\sigma$ -матрица связана через  $\delta^c$  – кулоновский фазовый сдвиг [13] с короткодействующей  $\mathbf{S}$ -матрицей из (10) соотношениями  $\check{\mathbf{S}}_\sigma = \exp(i\delta^c) \mathbf{S}_\sigma \exp(i\delta^c)$ ,  $\sigma = \pm 1$  – z-чётность.

#### Обсуждение и анализ результатов

Представленные ниже результаты решения краевых задач для уравнений (4) и (6) моделей А и Б (КЯ, КПр и КТ) в сферических и цилиндрических координатах получены с помощью программ ODPEVP [7] и KANTBP [8]. Для вычисления с заданной точностью энергии (основного состояния) с восемью значащими цифрами использовался набор  $j_{\max} = 10$  базисных функций в (3) и дискретизация искомого решения методом конечных элементов четвёртого порядка точности по шагу сеток на интервалах  $[x_f^{\min}, x_f^{\max}]$  и  $[x_s^{\min}, x_s^{\max}]$ .





На рис. 7 показаны зависимости энергии связи электрона от радиуса КТ для моделей А и Б. С уменьшением  $r_0$  энергия связи  $E_B/E_R^*$  увеличивается, так как уменьшается область локализации электрона вокруг примесного центра.

Из сравнения кривых 1, 2 и 3 видно, что оценка подгоночного параметра  $\gamma_{r_0} = \pi^2/3$  обеспечивает качественное согласование моделей А и Б.

На рис. 8 показаны зависимости энергии связи электрона от магнитной длины  $a_H^*/a_B^* = 1/\sqrt{\gamma}$  для моделей А и Б. Из сравнения кривых 1, 4 и 3 видно, что оценка подгоночного параметра  $\gamma_{r_0} = \pi^2/3$  обеспечивает качественное согласование моделей А и Б. При увеличении  $H$  (уменьшении  $a_H$ ) энергия связи растёт. Это связано с тем, что при больших  $H$  задача всё более приближается к одномерной как для КТ, так и для КПр (рис. 9, 10).

На рис. 11 показаны зависимости энергии связи электрона от величины магнитного поля  $\gamma^* = H/H_0, H_0 = 6$  Тл для модели А при  $\omega = 0$ , вычисленные в различных приближениях. В соответствии с изменяющейся симметрией задачи верхние (кривые 2 и 4) и

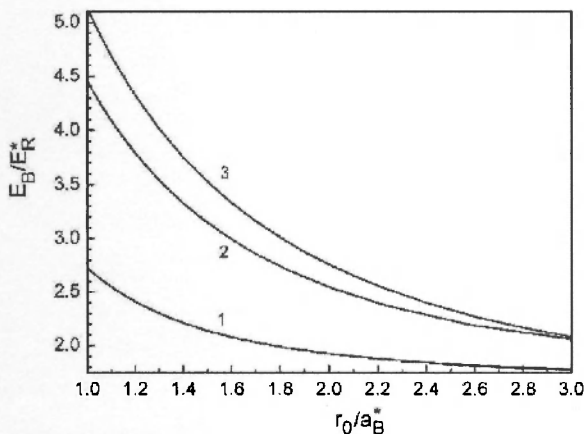


Рис. 7. Зависимости энергии связи электрона  $E_B/E_R^* = -(E(q=1) - E_0(q=0))/E_R^*$  – разности между энергиями электрона в КТ без примеси  $E_0(q=0)$  и с примесью  $E_1(q=1)$ , от радиуса КТ ( $1 < r_0 < 3$ ): 1 и 2 – с параболическим потенциалом  $\omega = 1/r_0^2$  и  $\omega = \pi^2/(3r_0^2)$ ; 3 – с потенциалом бесконечно высокой стенки, при фиксированном магнитном поле  $\gamma = 1$  ( $H_0^* = 6$  Тл)

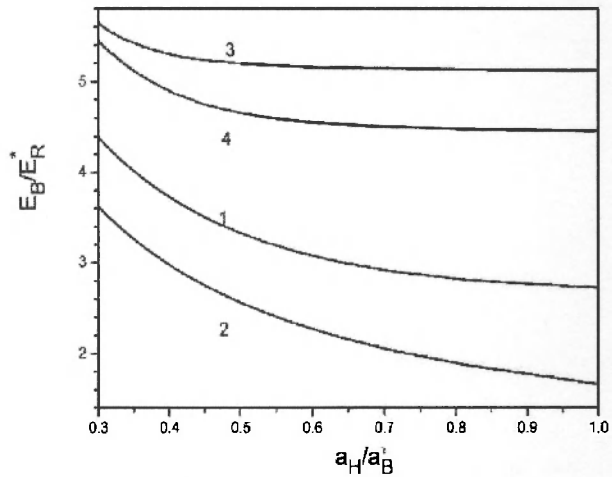


Рис. 8. Зависимости энергии связи электрона  $E_B/E_R^*$  от напряженности магнитного поля  $a_H^*/a_B^* = 1/\sqrt{\gamma}$ ,  $1 < \gamma < 11$ , при фиксированном  $r_0 = a_B^*$  радиусе КТ: 1 и 4 – примесный электрон в параболической КТ при наличии ограничивающего потенциала с частотой  $\omega = 1/r_0^2$  и  $\omega = \pi^2/(3r_0^2)$ ; 2 – примесный электрон без ограничивающего потенциала ( $\omega = 0$ ); 3 – примесный электрон в КТ с потенциалом бесконечно высокой стенки

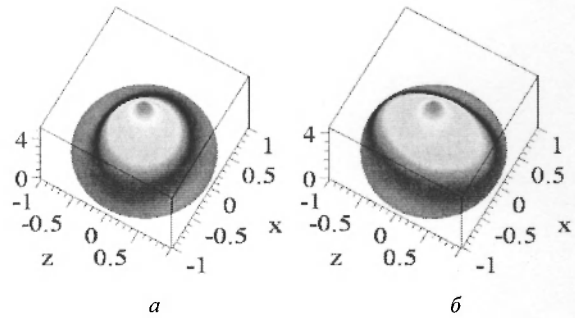


Рис. 9. Модель БКТ при  $r_0 = 1$ . Профили в плоскости  $xz$  волновых функций  $\Psi$  основного примесного состояния при значении магнитного поля: а –  $\gamma^* = 1$ , б –  $\gamma^* = 10$

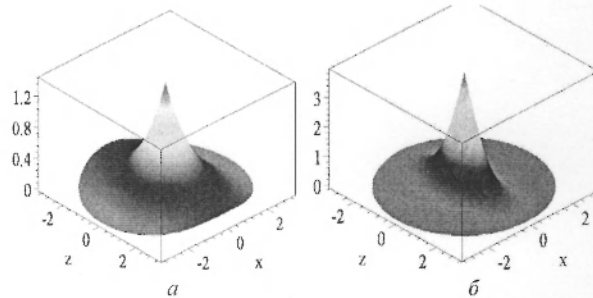


Рис. 10. Модель А КТ (КПр) при  $\omega = 0$ . Профили в плоскости  $xz$  волновых функций  $\Psi$  основного примесного состояния при значении магнитного поля: а –  $\gamma^* = 1$ , б –  $\gamma^* = 10$

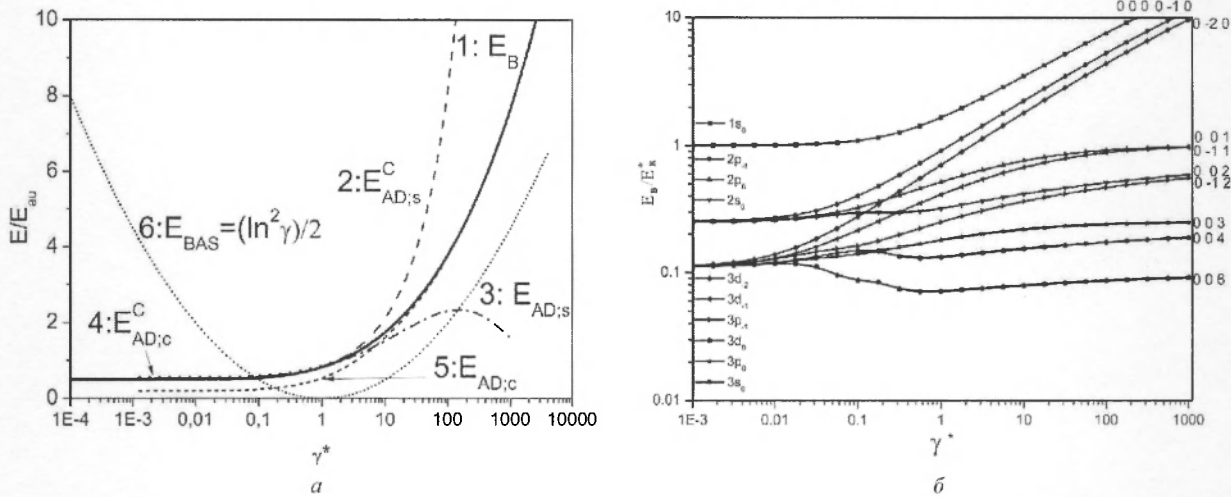


Рис. 11. Зависимости энергий связи электрона в КПр (модель А при  $\omega = 0$ ) от величины магнитного поля  $\gamma = H/H_0, H_0^* = 6$  Тл: а – энергия связи основного состояния ( $v = 1$ )  $E / E_{Bu} = E_B / (2E_R^*)$ , вычисленная в различных приближениях: кривая 1 – с заданной точностью, кривые 2 и 4 – грубое адиабатическое приближение ( $j_{max} = 1, W_{11} = 0$ ) в СК и ЦК, кривые 3 и 5 – адиабатическое приближение ( $j_{max} = 1$ ) в СК и ЦК, б – оценка  $E_{BAS} = (\ln^2 \gamma) / 2$  с логарифмической точностью; б – первые десять уровней удвоенной энергии связи  $E_B / E_R^* = \gamma^* - 2E_v, v = 1, \dots, 10$

нижние (кривые 3 и 5) оценки приближаются к значению, вычисленному с заданной точностью (кривая 1), при  $\gamma < 1$  для разложения (3) по базисным функциям в СК и при  $\gamma^* > 50$  – в ЦК. Заметим, что стандартная оценка (кривая б) с логарифмической точностью [13] примерно в три раза отличается от точной (кривая 1) и требует соответствующего уточнения [15].

На рис. 12 показаны зависимости энергии связи электрона от положения кулоновского сдвига  $z_c$  в КЯ для моделей А и Б, вычисленные в различных приближениях с использованием базисных функций в СК и ЦК. Разложение (3) в ЦК имеет низкую скорость сходимости, что связано с его нефакторизуемостью по  $z, \rho$  и невыполнением краевых условий типа Като в окрестности точки  $z = z_c$ , как и в окрестности точки  $z = 0$  для КТ и КПр [16].

На рис. 13, 14 показаны профили волновых функций основного примесного состояния без сдвига и со сдвигом кулоновского центра в КЯ для моделей А и Б. В соответствии с поведением базисных функций (см. рис. 5) на рис. 13 виден сдвиг максимума  $z_{max} = 0.4$  волновой функции, соответствующий сдвигу кулоновского центра  $z_c = 0.4$  для

модели А КЯ с параболическим ограничивающим потенциалом.

С другой стороны, в соответствии с поведением базисных функций (см. рис. 6) на рис. 14 виден незначительный сдвиг максимума  $z_{max} = 0.04$  волновой функции, соответствующий сдвигу кулоновского центра  $z_c = 0.4$  для модели Б КЯ с потенциальной ямой с бесконечно высокими стенками, в отличие от более реалистических моделей со стенками конечной высоты или модели А с параболическим ограничивающим потенциалом. Различие в поведении функций можно использовать для верификации моделей А и Б и др.

Коэффициент примесного поглощения  $K(\omega_{ph})$  в параболической квантовой яме из GaAs вычислялся с помощью вариационных функций [14]:

$$K(\omega_{ph}) = \frac{4\pi^2 e^2}{km_e^2 c \omega_{ph} V} \sum_{i,f} |\vec{e} \vec{M}_{if}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_{ph}), \quad (13)$$

где  $V$  – объем образца,  $\vec{e}$  – вектор поляризации и  $\omega_{ph}$  – частота падающей электромагнитной волны,  $\vec{M}_{if}$  – матричный элемент перехода из начального состояния  $i$  в конечное состояние  $f$ ,  $E_i$  – энергия начального состояния,  $E_f$  – энергия конечного состояния,

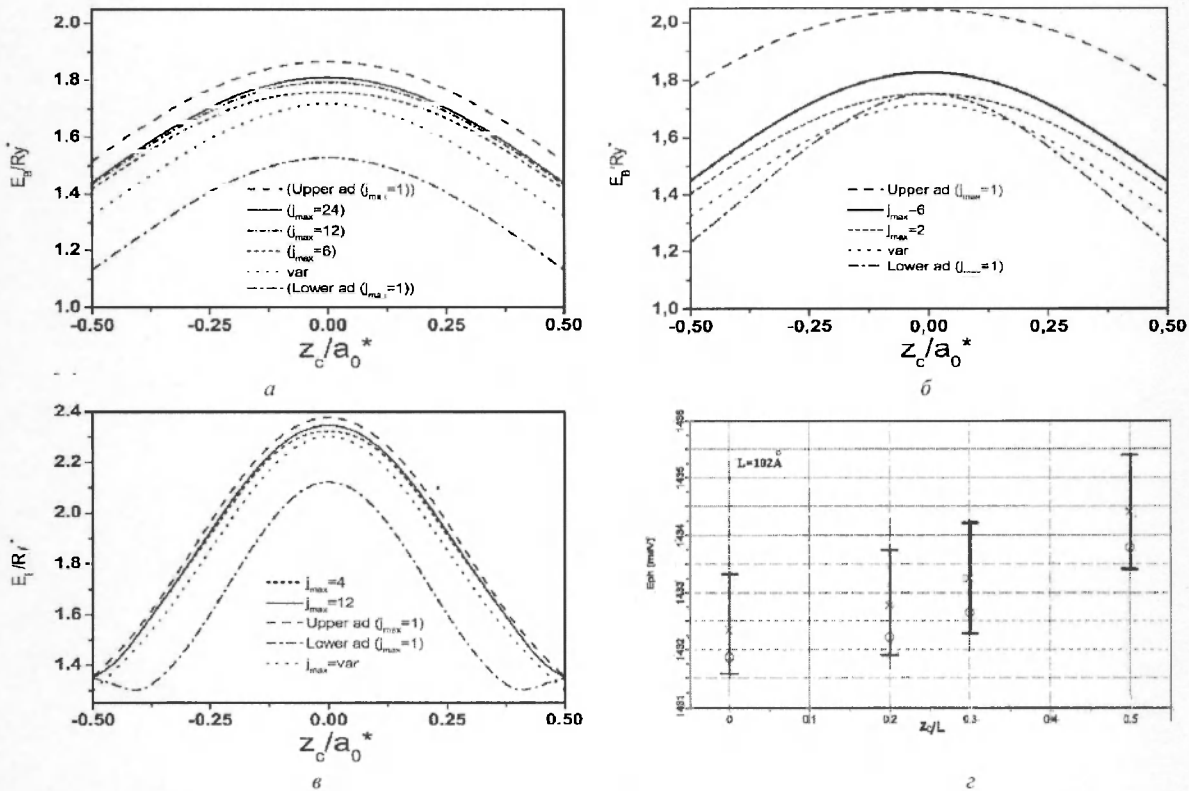


Рис. 12. Зависимость вычисленной энергии связи модели А параболической КЯ от положения кулоновской примеси  $z_c$  при  $q = 1, m = 0, \omega = 3$  в ЦК и СК: а, б, в – модели Б КЯ с бесконечно высокими стенками при  $L = 1$  в ЦК в различных приближениях: (upper ad) ( $j_{max} = 1$ ) – грубое адиабатическое приближение  $W_{11} = 0$ ; (lower ad) ( $j_{max} = 1$ ) – адиабатическое приближение; ( $j_{max} = 2, 4, 6, 12, 24$ ) – в зависимости от числа базисных функций  $j_{max}$ ; (var) – вариационный расчет [14]; г – интервалы резонансных энергий фотона  $E_{ph} = \omega_{ph}\hbar = E_f - E_i$ , определяющие максимальные значения коэффициента поглощения,  $K(\omega_{ph})$ , в зависимости от положения примеси  $z_c/L$ : отрезки – верхние и нижние адиабатические оценки, крестики – вариационный расчет [14], кружки – адиабатический расчет

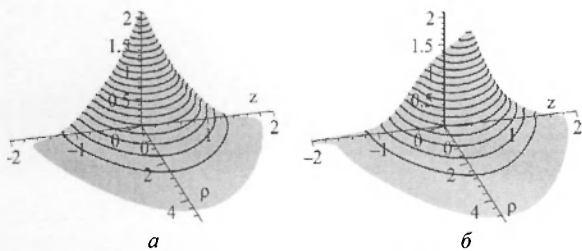


Рис. 13. Модель А при  $q = 1, m = 0, \omega = 3$ . Профили в плоскости  $\rho z$  волновых функций  $\Psi$  основного примесного состояния модели КЯ в зависимости от значения сдвига кулоновского центра: а –  $z_c = 0$ , б –  $z_c = 0.4$

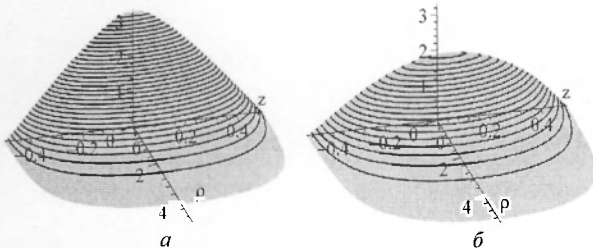


Рис. 14. Модель Б при  $q = 1, m = 0, L_0 = 1$ . Профили в плоскости  $\rho z$  волновых функций  $\Psi$  основного примесного состояния модели КЯ в зависимости от значения сдвига кулоновского центра: а –  $z_c = 0$ , б –  $z_c = 0.4$

а наличие  $\delta$ -функции в (13) обеспечивает закон сохранения энергии при переходах. Полученные верхние и нижние оценки и значения с заданной точностью энергии  $E_i = E_0 - E_B$  примеси позволяют уточнить границы интервалов значений резонансной энергии фотона  $E_{ph} = \hbar\omega_{ph} = E_f - E_i$  (см. рис. 12, г), в которых будут находиться «пиковые» (максимальные) значения коэффициента поглощения  $K(\omega_{ph})$  в зависимости от положения примеси (рис. 15, 16).

Эффективность разработанных методов, алгоритмов и созданных комплексов программ ODPEVP [7] и KANTBP [8] подтверждена результатами численного анализа полученных теоретических оценок погрешности решений краевых задач и результатами анализа моделей типа А КПр для следующих физических процессов:

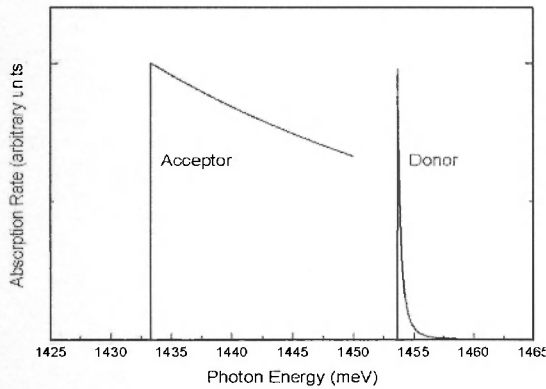


Рис. 15. Различие кривых поглощения при переходах акцептор → зона проводимости (Acceptor) и валентная зона → донор (Donor) при  $L = 100 \text{ \AA}$ ,  $m_v/m_c = 9.2$

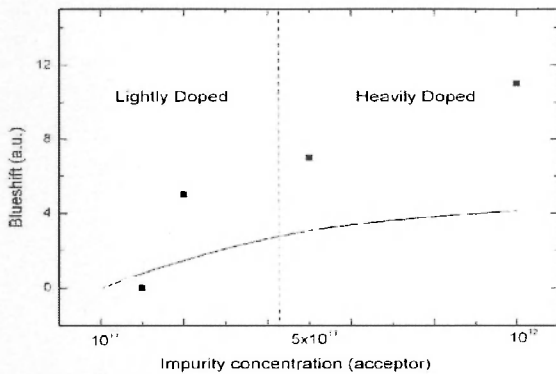


Рис. 16. Зависимость синего смещения для переходов донор-акцептор от концентрации доминирующей (акцептор) примеси: квадраты – результаты эксперимента [17], сплошная линия – результаты расчетов [18], слева – область низких концентраций, справа – область высоких концентраций

а) проведено численное исследование модели резонансного механизма фотоионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атома антиводорода в однородном магнитном поле  $\gamma = H/H_0$ ,  $H_0 = 2.35 \cdot 10^5 \text{ Т}$  (рис. 17). Впервые предсказаны (рис. 18, а) эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле [19];

б) выполнено численное исследование модели осевого каналирования одноименно заряженных частиц в эффективном параболическом потенциале с частотой  $\omega = 1/2$ . Выявлен немонотонный характер зависимости от энергии  $E$  столкновения коэффициента усиления  $K(E)$ , обусловленный впервые предсказанными резонансными эффектами отражения, и прохождения каналированных ионов [19, 20] (рис. 18, 19).

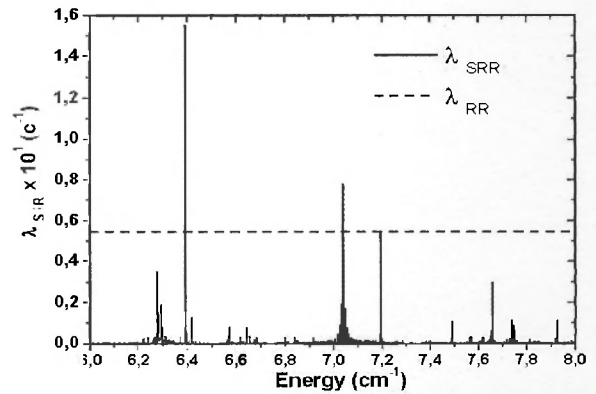
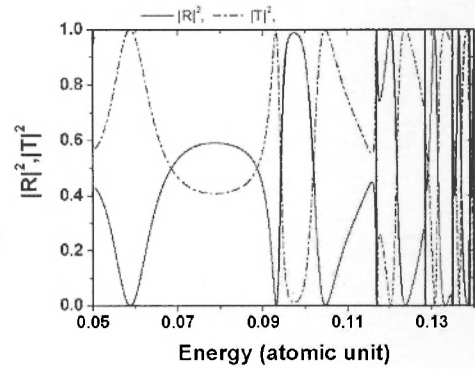
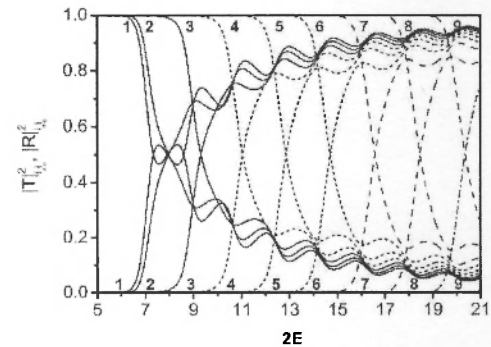


Рис. 17. Зависимость скорости лазерно-стимулированной рекомбинации в состоянии  $3s_0$  на один антипротон по отношению к начальной энергии позитрона  $E$  (при  $q = 1$ ,  $m = 0$ ):  $\lambda_{SRR}$  при  $\gamma = 2.595 \cdot 10^{-5}$  ( $H \sim 6 \text{ Тл}$ ) (сплошная линия),  $\lambda_{RR}$  при  $\gamma = 0$  во все состояния с  $N = 3$  (пунктирная линия [21])



а



б

Рис. 18. Зависимость от энергии: а – коэффициентов прохождения  $|T|^2$  и отражения  $|R|^2$  при  $q = 1$ ,  $m = 0$ ,  $\gamma = 1 \cdot 10^{-1}$ ; б – диагональных элементов амплитуд прохождения  $|T|_{i_0}^2$  и отражения  $|R|_{i_0}^2$ , соответствующим первым девяти открытым каналам ( $i_0 = 1 \div 9$ ), в зависимости от энергии ( $2E$ ) для эффективного заряда  $q = -6$  и  $\omega = 1/2$  (в масштабированных единицах [20])

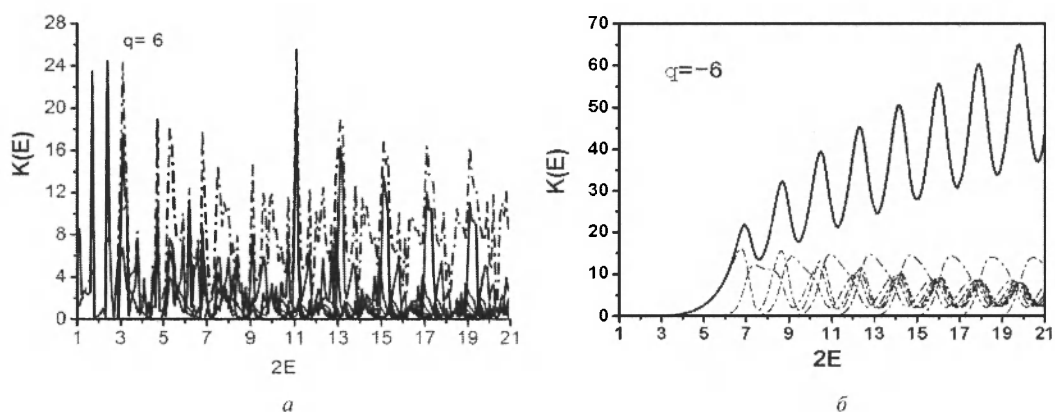


Рис. 19. Суммарный коэффициент усиления  $K(E) = |\Psi(r=0, E, \gamma)|^2 / |\Psi(r=0, E, \gamma=0)|^2$  (сплошная линия) и парциальные вклады (пунктирные линии) открытых каналов  $i_0 = 1-10$  в зависимости от  $E$  для эффективного заряда  $q = 6$  (а) и  $q = -6$  (б),  $\omega = 1/2$  (в масштабированных единицах [20])

### Заключение

Перспективы дальнейшего развития и применения метода Канторовича [22], алгоритмов и комплекса программ [23] при решении краевых задач для уравнения эллиптического типа с использованием подходящих параметрических базисных функций связаны с изучением новых механизмов формирования примесных и экситонных состояний моделей квантовых полупроводниковых наноструктур и спектральных, кинетических, транспортных и оптических характеристик: квантовых ям, квантовых проволок, квантовых точек, в зависимости от их строения и внешних полей, а также моделей процессов ионизации и рекомбинации водородоподобных атомов в магнитном поле или процессов каналирования ионов в кристалле и квантовой проволоке.

Примечательно, что для задачи непрерывного спектра в моделях КПр имеют место эффекты резонансного прохождения и полного отражения как разноименно, так и одноименно заряженных частиц (см. рис. 17), поскольку ограничение по поперечной переменной соответствует наложению однородного магнитного поля по продольной переменной [24] или ограничивающего осцилляторного потенциала канала кристалла [19, 20] по поперечной переменной.

При кулоновском рассеянии в магнитном поле отношение квадрата модуля волновой функции в нуле к квадрату модуля куло-

новской функции, так называемый коэффициент усиления, имеет немонокотное поведение в зависимости от энергии столкновения (см. рис. 19) при различных значениях магнитного поля или ограничивающего осцилляторного потенциала канала кристалла [19, 20], что может приводить при резонансных энергиях к дополнительному увеличению скорости образования экситона в результате поглощения электроном в валентной зоне фотона по сравнению со скоростью образования экситона в отсутствие магнитного поля [25, 26]. Возможно, что указанные резонансные квантовые эффекты найдут применение при описании транспорта квантового тока в полупроводниковых наноструктурах [6, 27, 28, 29].

*Работа выполнена в рамках протокола 3967-3-6-09/11 о сотрудничестве ОИЯИ с РАН [29] в области динамики конечномерных квантовых моделей и наноструктур во внешних полях и поддержана грантом РФФИ 08-01-00604а и грантом Президента РФ МК-2344.2010.2.*

### Список литературы

1. Born M., Oppenheimer R. Zur Quantentheorie der Molekeln // Annalen der Physik. 1927. Bd.84. P.457-484; Born M. Die Verbindung der elektronischen und nuklearen Bewegungen in den Molekulan und den Kristallen // Festschrift Goett. Nach. Math. Phys. 1951. K1. P.1-6.
2. Канторович Л.В., Крылов В.М. Приближенные методы высшего анализа. Л.: Гостехиздат. 1952.





3. Власова З.А. О методе приведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям // Работы по приближенному анализу: Тр. МИАН СССР. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1959. Т.53. С.16–36.
4. Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Markovski B.L., Serov V.V., Vinitsky S.I. Algorithm for reduction of boundary-value problems in multistep adiabatic approximation // Proc. of Intern. Conf. on Computer Algebra and Differential Equations (CADE 2009). Pamplona, Spain, 2009; <http://arxiv.org/abs/1005.2089>
5. Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N.N. Quantum Dot Heterostructures. N.Y.: John Wiley and Sons, 1999; Saleh B.E.A., Teich M.C. Fundamentals of photonics, 2nd ed. N.Y.: John Wiley & Sons, Inc., 2007.
6. Miura N. Physics of Semiconductors in High Magnetic Fields. N.Y.: Oxford University Press Inc., 2008.
7. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G. ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem // Comput. Phys. Commun. 2009. Vol.180. P.1358–1375.
8. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G. KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach // Comput. Phys. Commun. 2008. Vol.179. P.685–693.
9. Ramdas Ram-Mohan L. Finite Element and Boundary Element Application in Quantum Mechanics. N.Y.: Oxford University press, 2002.
10. Виноцкий С.И., Гусев А.А., Чулуунбаатар О., Дербов В.Л., Казарян Э.М., Саркисян А.А. Адиабатическое описание примесных состояний квантовой точки в сильном магнитном поле // Материалы 13-й Междунар. школы для студентов и молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофизике Saratov Fall Meeting, SFM'09. Саратов, 2009.
11. Vinitsky S.I. Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Gusev A.A., Rostovtsev V.A. Symbolic-Numerical Algorithms for Solving Parabolic Quantum Well Problem with Hydrogen-Like Impurity // LNCS. 2009. Vol.5743. P.334–349.
12. Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitsky S.I., Derbov V.L., Kazaryan E.M., Kostanyan A.A., Sarkisyan H.A. Adiabatic approach to the problem of a quantum well with a hydrogen-like impurity // ЯФ. 2010. Т.73, №2. С.352–359.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
14. Карнаков Б.М., Попов В.С. Атом водорода в сверхсильном магнитном поле и эффект Зельдовича // ЖЭТФ. 2003. Т.124. С.996–1022.
15. Kazaryan E.M., Kostanyan A.A., Sarkisyan H.A. Impurity optical absorption in parabolic quantum well // Physica E. 2005. Vol.28. P.423–430.
16. Guzman A., Sanchez-Rojas J.L., Tijero J.M.G., Sanchez J.J., Hernando J., Calleja E., Mufioz E., Vergara G., Montojo M.T., Gornez L.J., Rodriiguez P., Alrnazan R., Verdu M. Optical characterisation of quantum well infra-red detector structures // IEE Proceedings Optoelectronics. 1999. Vol.146. P.89–92.
17. Kazaryan E.M., Kostanyan A.A., Sarkisyan H.A. Optical absorption in GaAs quantum wells caused by donor acceptor pair transitions // J. Phys. Cond. Mat. 2007. Vol.19. P.046212.
18. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I., Derbov V.L., Melnikov L.A., Serov V.V. Photoionization and recombination of a hydrogen atom in a magnetic field // Phys. Rev. A. 2008. Vol.77. P.034702–1–4.
19. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L., Krassovitskiy P.M., Vinitsky S.I. Channeling Problem for Charged Particles Produced by Confining Environment // ЯФ. 2009. Т.72. С.768–778.
20. Виноцкий С.И., Гусев А.А., Чулуунбаатар О., Дербов В.Л., Серов В.В., Красовицкий П.М. Эффекты резонансного прохождения и отражения каналированных ионов при наличии поперечного осцилляторного потенциала // Моделирование нелинейных процессов и систем: Материалы Междунар. науч. конф. / ГОУ ВПО МГТУ «Станкин 2009»; под ред. Л.А. Уваровой. М.: Янус-К, 2009. С.402–422.
21. Ryabinina M.V., Melnikov L.A. Laser-induced antiproton-positron recombination in traps // Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B. 2004. Vol.214. P.35–39.
22. Общероссийский математический портал // URL: <http://www.mathnet.ru> (дата обращения: 02.06.2010).
23. О. Chuluunbaatar's home page // URL: <http://www.info.jinr.ru/chuka/>; Group of Algebraic and Quantum Computations, Alexander Gusev // <http://compalg.jinr.ru/CAGroup/Gusev/> (дата обращения: 02.06.2010).
24. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L., Kaschiev M.S., Mardoyan L.G., Serov V.V., Tupikova T.V., Vinitsky S.I. Adiabatic representation for a hydrogen atom photoionization in an uniform magnetic field // ЯФ. 2008. Т.71, №5. P.871–878.
25. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
26. Усанов Д.А., Сучков С.Г. Многочастичные квантовые эффекты в физике твёрдого тела. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2007.
27. Fu Y., Willander M. Physical Models of Semiconductor Quantum Devices. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1999.
28. Sundqvist P.A., Zhao Q.X., Willander M. Boundary conditions for electron tunneling in complex two- and three-dimensional structures // Phys. Rev. B. 2005. Vol.72. P.165103–1–14.
29. Российско-Армянский (Славянский) университет, физико-технический факультет // URL: [http://www.rau.am/faculties.php?l=1&add\\_page=1&f\\_id=6&l1=36&l2=37](http://www.rau.am/faculties.php?l=1&add_page=1&f_id=6&l1=36&l2=37) (дата обращения: 02.06.2010).