

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Штыгашев Александр Анатольевич

**Пространственно-временные и спектральные
характеристики нестационарных волновых
процессов в неоднородных конденсированных
средах**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Новосибирск – 2012

Работа выполнена в *Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Новосибирский государственный технический университет»*.

Научный консультант: доктор физико-математических наук, доцент,
Пейсахович Юрий Григорьевич

Официальные оппоненты:

Вальков Валерий Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, г. Красноярск, зав. лабораторией

Слабко Виталий Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет», г. Красноярск, профессор

Сатанин Аркадий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВПО «Нижегородский государственный университет», г. Нижний Новгород, профессор

Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет), г. Новосибирск

Защита состоится «____» _____ 2013 г. в ____ часов на заседании диссертационного совета Д 003.055.02 в *Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук*, расположенном по адресу: 660036, Красноярск, Академгородок 50, стр. 38, в конференц-зале главного корпуса.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук

Автореферат разослан «____» _____ 2012 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета,

доктор физико-математических наук

Втюрин А.Н.

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Важными объектами исследований в физике конденсированного состояния вещества являются пространственно-неоднородные структуры. Наличие границ между фазами вещества или материалами смежных сред приводит к дифракции волн, распространяющихся в таких структурах. Дифракционные процессы во многом определяют величину и поведение транспортных, оптических, электродинамических характеристик этих систем. С помощью внешних полей или путем изменения геометрических характеристик и подбором материалов слоев пространственно-неоднородных структур можно осуществлять управляемую перестройку частотно-энергетических спектров элементарных возбуждений и амплитуд рассеяния волн.

Реальные волновые процессы являются нестационарными и зачастую нелинейными. Многие нестационарные волновые процессы в пространственно-неоднородных структурах в рамках линейного приближения можно описывать суперпозициями большого числа стационарных волн, образующих волновые пакеты, которые переносят энергию, заряд, массу и т.д. В пространственно-неоднородных структурах могут возбуждаться квазистационарные состояния. Нестационарные процессы, связанные с формированием и распадом квазистационарных состояний в резонансно-туннельных системах с небольшим числом потенциальных барьеров, интенсивно изучаются в связи с разработкой перспективных устройств микро- и наноэлектроники. Представляет интерес детальное исследование аналогичных процессов, происходящих в многобарьерных периодических и непериодических структурах. В диссертации изучены квазистационарные состояния в поверхностных гетероструктурах, в сверхрешетках в отсутствие и при наличии внешних силовых полей, в одномерных цепочках наночастиц, в многослойных периодических и непериодических структурах «магнетик/немагнетик».

Изучение временной зависимости характеристик формирования и распада квазистационарных состояний позволяет получить информацию об энергии, спектральной ширине резонансных уровней и времени жизни возбужденных состояний. Возбуждение одновременно нескольких резонансных состояний приводит к осцилляциям распадного тока с частотами, соответствующими разностям энергий этих возбужденных квазистационарных состояний. Исследование возможности получения высокочастотных осцилляций тока, обусловленных наличием в поверхностной гетероструктуре квазистационарных резонансных состояний, актуально в связи с разработкой новых квантовых приборов, являющихся элементной базой наноэлектроники, для получения преобразователей электромагнитного излучения в переменный ток гига- и терагерцового диапазона.

Основное содержание диссертации составляет исследование волновых процессов в твердотельных пространственно-неоднородных структурах. Такие структуры, как правило, имеют выделенное направление, поэтому при описании волновых процессов используется приближенное или точное разделение переменных двух- или трехмерных волновых уравнений и сведение их к одномерным моделям. Одномерные волновые уравнения являются основными моделями в диссертационном исследовании.

Целью диссертационной работы является исследование стационарных и нестационарных квантовых и классических линейных волновых процессов, происходящих в пространственно-неоднородных структурах, посредством разработки математических моделей и алгоритмов расчета пространственно-временных и спектральных характеристик волновых полей и процессов переноса.

Научная новизна результатов диссертационной работы состоит в следующем:

1. Изучен процесс заселения и распада квазистационарных состояний в многобарьерных структурах при прохождении квантового волнового пакета. Найдена зависимость от длины решетки для времени жизни квазистационарных состояний и времени прохождения пакетов. Эта зависимость

различна в случаях, когда резонансное состояние и спектральный центр пакета лежат в середине, либо на краю полосы пропускания.

2. Исследован коллапс резонансов полной прозрачности в двойной периодической зеркально-симметричной сверхрешетке.

3. Предложено объяснение двух режимов временной зависимости вероятности нахождения электронов в системе «молекула сенсibilизатора – слой наночастиц» фотоэлектрохимического элемента, исследовано влияние буферного слоя наночастиц на процесс переноса электрона и среды на электронные переходы в молекуле.

4. Построена теория нестационарной фотоэмиссии через поверхностную трехбарьерную гетероструктуру, основанная на методе матрицы плотности и учитывающая неупругие процессы рассеяния электронов. Рассчитаны параметры осцилляций фотоэмиссионного тока.

5. Для монохроматической циркулярно-поляризованной ультразвуковой волны, падающей на многослойную среду, состоящую из чередующихся ферромагнитных и немагнитных материалов, получены спектры коэффициентов прохождения и отражения в области магнитоакустического резонанса (МАР) без учета и с учетом затухания упругих и спиновых возбуждений в системе. Показано, что взаимодействие упругой и спиновой волн может приводить к полному отражению ультразвука. Изучены характеристики магнитоупругих квазистационарных состояний ферромагнитной пластины при изменении её толщины и внешнего магнитного поля. Исследована динамика прохождения ультразвукового импульса через ферромагнитный слой в области МАР.

6. Получено спектральное уравнение и проведены численные расчеты спектра андреевских состояний в несимметричном S_1NS_2 -переходе при разных радиусах поверхностей Ферми в слоях структуры.

Научная и практическая значимость работы. Разработанный в диссертации подход позволяет расширить круг решаемых задач при моделировании волновых процессов в многослойных пространственно-неоднородных структурах и увеличить точность их описания.

Алгоритмы и результаты расчета состояний электронов в решетках конечной длины во внешних полях могут быть применены при описании баллистических и диссипативных токов через контакты и гетероструктуры, при разработке многослойных фотодиодов, фотоприемников электромагнитных излучений и квантовых каскадных лазеров.

Численное моделирование процесса переноса фотоэлектрона через буферный слой наночастиц в коллектор фотоэлектрохимической ячейки позволяет продемонстрировать и оценить влияние на перенос заряда размеров и дисперсии размеров наночастиц. Результаты моделирования могут учитываться при разработке эффективных солнечных элементов на органических красителях.

Из построенной теории нестационарной фотоэмиссии следует, что при прохождении тока через поверхностную трехбарьерную гетероструктуру могут возникать осцилляции фотоэмиссионного тока с частотой, определяемой параметрами гетероструктуры. Предсказанный эффект осцилляций тока может быть использован в фотокатодах с переменной составляющей тока в гига- и терагерцовом диапазонах, он может быть применен для измерения времени релаксации электронов в фотокатодах.

Результаты расчетов характеристик квазистационарных состояний электронов в квантовых слоистых и многослойных пространственно-неоднородных структурах могут использоваться при разработке перспективных устройств микро- и наноэлектроники. Аналогичные результаты для квазистационарных состояний магнитоупругих волн в классических многослойных структурах могут быть полезны при разработке и описании работы устройств магнитной электроники, в частности, для создания полосно-заграждающего фильтра ультра- и гиперзвуковых частот, управляемого внешним магнитным полем.

Научные положения и результаты, выносимые на защиту.

1. Результаты моделирования распространения волновых пакетов в многослойных структурах в отсутствие и при наличии внешних силовых полей. Диаграммы локальной устойчивости стационарных функций элект-

трона в решетке в сильном электрическом поле. Асимптотические и численные оценки характеристик распространения пакетов, формирования и распада квазистационарных состояний в зависимости от длины решетки, спектрального состава пакета и его положения по отношению к полосам пропускания. Показано, что время жизни пороговых квазистационарных состояний пропорционально третьей степени длины решетки, а для квазистационарных состояний средней части полосы пропускания время жизни пропорционально длине решетки. Распадный ток из многобарьерных структур может осциллировать с частотами, определяемыми энергиями смешиваемых квазистационарных состояний.

2. Показано, что в полосах пропускания зеркально-симметричных двойных сверхрешеток существуют смежные резонансы полной прозрачности, для которых коллапс резонансов единичной прозрачности наступает при увеличении высоты или толщины барьера внутренней подрешетки. Время жизни соответствующих квазистационарных состояний уменьшается.

3. Модель электронного транспорта в системе «молекула сенсibilизатора – слой наночастиц – коллектор», позволяющая объяснить два экспериментально наблюдаемых режима быстрого и медленного убывания вероятности заселения возбужденного электронного состояния молекулы красителя. Анализ температурного уширения однородных оптических линий примесных молекул в аморфных средах.

4. Основанная на методе матрицы плотности теория нестационарной импульсной фотоэмиссии и стационарной фотоэмиссии из фотокатода с поверхностной гетероструктурой. Из этой теории следует, что фотоэмиссионный ток через поверхностную трехбарьерную гетероструктуру может осциллировать.

5. Решение системы связанных волновых уравнений для упругих и спиновых волн в многослойной структуре. Результаты исследования процессов рассеяния стационарной ультразвуковой волны и ультразвукового импульса на ферромагнитной пластине и магнитной сверхрешетке в области магнитоакустического резонанса (МАР) при произвольных условиях

закрепления спинов на поверхности. Показано, что при резонансных частотах вблизи МАР происходит полное отражение ультразвука (антирезонансы Фано), вызываемое взаимодействием упругой волны со спиновыми волнами, локализованными в магнитных слоях. Изменением параметров исходного волнового пакета можно целенаправленно возбуждать в магнитных слоях квазистационарные состояния и вторичные импульсы, обусловленные интерференцией и перекачкой энергии между упругой и спиновой подсистемами.

6. Численно-аналитическое исследование спектра андреевских состояний в несимметричном S_1NS_2 переходе при разных поперечных импульсах Ферми в слоях. Показано, что при увеличении разности поперечных импульсов Ферми фазовая зависимость спектра энергий стационарных андреевских состояний ослабевает.

Апробация результатов работы. Основные результаты исследований докладывались и обсуждались на Всесоюзном симпозиуме с международным участием по новым методам лазерной спектроскопии в низкотемпературных средах (Таллин, 1987); Всесоюзном совещании по люминесценции молекул и кристаллов (Таллин, 1987); III Российско-корейском симпозиуме по науке и технике (Новосибирск, 1999); 32 Всероссийском совещании по физике низких температур (Казань, 2000); международных конференциях по актуальным проблемам электронного приборостроения (Новосибирск, 2004, 2006, 2008, 2010); совещании «Кремний-2004» (Иркутск, 2004); IX Российской конференции по физике полупроводников (Новосибирск-Томск, 2009); международной конференции с элементами научной школы для молодежи «Нанопизика и наноэлектроника» «Мезоскопические структуры в фундаментальных и прикладных исследованиях» (Новосибирск, 2010); IV Байкальской международной конференции «Магнитные материалы. Новые технологии» (Иркутск, 2010); X Всероссийской научной конференции «Кравые задачи и математическое моделирование» (Новокузнецк, 2010); Российской конференции и школе по актуальным проблемам полупроводниковой нанофотозлектроники «Фотоника-2011» (Новосибирск, 2011); между-

народной зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка-34» (Новоуральск, 2012); научных сессиях и семинарах профессорско-преподавательского состава НГТУ и научных учреждений СО РАН.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 28 научных работ, из них – 19 статей из списка ВАК, 9 работ — в материалах и трудах российских и международных научных и научно-технических конференций и совещаний, в сборниках научных трудов и монография.

Личный вклад автора диссертации в получении выносимых на её защиту положений заключался в постановке физических проблем для их численного моделирования и получении ряда аналитических решений указанных задач; в разработке вычислительных алгоритмов и проведении вычислительных экспериментов; в анализе физического содержания представленных результатов численного моделирования; формулировке окончательных выводов исследований.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, приложения и списка литературы. Общий объем работы составляет 317 страниц машинописного текста, включая 86 рисунков, 2 таблицы и список литературы из 254 наименований.

Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

Первая глава содержит обзор литературы, в которой изложены основные результаты и намечены пути решения соответствующих задач.

Во **второй главе** описываются подходы к численно-аналитическому решению систем связанных линейных волновых уравнений, являющиеся основой гибридного алгоритма, который позволяет эффективно описывать волновые процессы в квазиодномерных пространственно-неоднород-

ных структурах во внешних силовых полях. Эти методы далее применяются при расчетах пространственно-временных и спектральных характеристик стационарных и нестационарных волновых полей в открытых и замкнутых системах.

Исходную систему связанных линейных стационарных волновых уравнений при частоте ω или энергии $E = \hbar\omega$ можно представить в виде неавтономной системы дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{d}{dx}\Psi(x) = \hat{D}(\omega, x)\Psi(x), \quad (1)$$

где $\Psi(x) = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N)^T$ – вектор-столбец состояния, а $\hat{D}(\omega, x)$ – динамическая матрица размерности $N \times N$. Решение $\Psi(x)$ в точке x связано с решением $\Psi(a)$ в точке a соотношением

$$\Psi(x) = M(x, a)\Psi(a), \quad (2)$$

где $M(x, a)$ – матрица перехода (трансфер-матрица) из a в x .

Расчетная область разбивается на сегменты $[x_i, x_{i+1}]$, внутри которых элементы динамической матрицы $\hat{D}(\omega, x)$ непрерывны. Вычисление трансфер-матрицы на сегментах $[x_i, x_{i+1}]$ производится либо на основе фундаментальной системы решений (ФСР) волновых уравнений, входящих в (1), либо на основе конечно-разностной (КР) схемы интегрирования системы уравнений (1). В зависимости от применяемой квадратурной схемы используются одношаговые и многошаговые трансфер-матрицы, обеспечивающие необходимую численную устойчивость. Матрица перехода из $a = x_i$ в $x = x_j$ находится последовательным перемножением трансфер-матриц через сегменты

$$M(x, a) = M_{j,j-1}M_{j-1,j-2} \dots M_{i+2,i+1}M_{i+1,i}. \quad (3)$$

Для задач, рассмотренных в **главе 3**, методы ФСР и КР, применяемые совместно, образуют основу гибридного алгоритма расчета волновых полей.

В **третьей главе** рассмотрены задачи об эволюции квантовых волновых пакетов в многослойных структурах, с учетом влияния внешних си-

ловых полей, при условии, что длина фазовой когерентности ξ_{ph} волн де Бройля больше толщины слоев.

В **разделе 3.1** рассмотрена задача одномерного рассеяния электронного волнового пакета, падающего слева на периодическую решетку конечной длины, содержащую N одинаковых ячеек с периодом элементарной трансляции d . Данная модель описывает композиционные сверхрешетки, являющиеся важными элементами приборов фотоники, опто- и наноэлектроники.

Эволюцию волнового пакета описывает решение нестационарного уравнения Шредингера в форме интеграла

$$\Psi(x, t) = \int c(E)\psi(E, x) \exp(-iEt/\hbar) dE, \quad (4)$$

где $\psi(E, x)$ – решения стационарного уравнения Шредингера, E – энергия стационарных состояний, $c(E)$ – спектральная функция

$$c(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(E, x)\Psi(x, 0)dx, \quad (5)$$

где $\Psi(x, 0)$ – волновая функция пакета в момент времени $t = 0$. При помощи метода трансфер-матрицы получены базисные решения $\psi(E, x)$ уравнения Шредингера, описывающие стационарное рассеяние падающей слева монокроматической волны. Парциальные амплитуды падающей A_0 , отраженной B_0 и прошедшей A_{N+1} волн связаны через эффективную трансфер-матрицу M_{ef} . Амплитуды и коэффициенты отражения $r(E) = B_0/A_0$, $R(E)$ и прохождения $t(E) = A_{N+1}/A_0$, $T(E)$ выражены через элементы эффективной трансфер-матрицы M_{ef} . Найдены нули амплитуды отражения $r(E)$ и полюсы амплитуд рассеяния $r(E)$ и $t(E)$ в плоскости комплексной переменной E вблизи порогов и в середине полос (зон) пропускания. Показано, что с увеличением N полюсы приближаются к вещественной оси энергий. Мнимая часть полюсов пороговых резонансных состояний много меньше мнимой части полюсов резонансных состояний середины полосы, соответственно, пороговые квазистационарные состояния являются более долгоживущими.

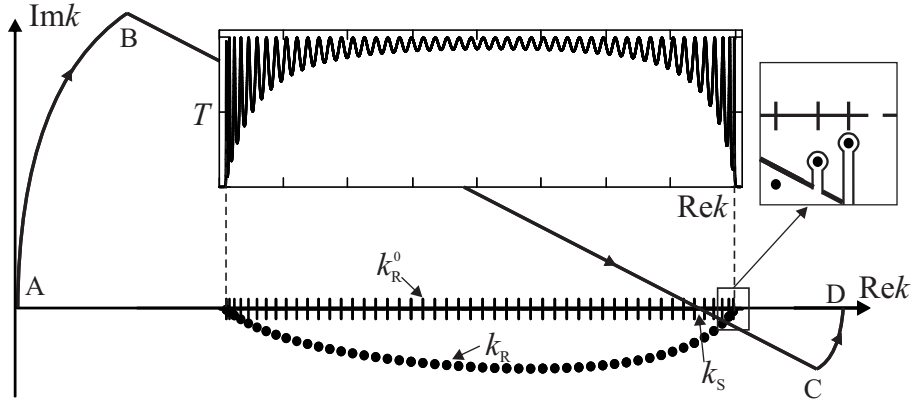


Рис. 1. Полоса пропускания $T(k)$, $k = \hbar^{-1}\sqrt{2mE}$, полюсы k_R , нули k_R^0 амплитуды отражения, k_S – седловая точка, ABCD – перевальный контур

Показано, что в зависимости от формы и спектрального состава падающего пакета решетка выделяет из пакета соответствующие резонансные спектральные компоненты, дифракционной модуляции подвергаются все части волновой функции как вне решетки, так и внутри. Получены приближенные аналитические формулы для $\Psi(x, t)$, описывающие вклады в (4) от полюсов амплитуд рассеяния и фазовой седловой точки, объясняющие наличие порогов и пространственно-временных осцилляций $\Psi(x, t)$. При заданных длине и других параметрах решетки по положению полюсов проведены аналитические и численные оценки энергии E_R , время жизни τ_R квазистационарных состояний вблизи порогов и в середине s -й полосы пропускания. Получены также аналитическое выражение и оценки групповой скорости v_g волнового пакета в решетке конечной длины. В частности, для решетки δ -барьеров в приближении сильной связи $(\Omega d/s\pi) \gg 1$ результаты представлены в таблице для двух случаев: (1) $\nu_1 \equiv \nu \ll N$ вблизи потолка или $\nu_1 \equiv (N - \nu) \ll N$ вблизи дна полос и (2) $\nu \approx N/2$, $\nu_2 \approx |\nu - N/2| \ll N$ в середине полос: (ν – номер квазистационарного состояния, отсчитанный от потолка полосы)

Таблица 1. Оценки E_R , τ_R , v_g и Δt

	E_R	τ_R	v_g	Δt
1	$E_{s0} \left(1 - \frac{4}{\Omega d} \left(1 - (-1)^s \left(1 - \frac{\pi^2 \nu_1^2}{2N^2} \right) \right) \right)$	$\frac{m\Omega^2 d^4 N^3}{8\pi^5 \hbar s^3 \nu_1^2}$	$\frac{2\pi^3 \hbar s^2 \nu_1}{m\Omega d^2 N}$	$\frac{m\Omega d^3 N^2}{2\pi^3 \hbar^2 s^2 \nu_1}$
2	$E_{s0} \left(1 - \frac{4}{\Omega d} \left(1 - (-1)^s \frac{\pi \nu_2}{N} \right) \right)$	$\frac{m\Omega^2 d^4 N}{8\pi^3 \hbar s^3}$	$\frac{2\pi^2 \hbar s^2}{m\Omega d^2}$	$\frac{m\Omega d^3 N}{2\pi^2 \hbar^2 s^2}$

Здесь $E_{s0} = (\hbar^2 \pi^2 s^2) / (2md^2)$ – пороговая энергия, $\Omega = \hbar^{-2} 2mU_b b$ – мощность δ -барьера, U_b – высота, а b – толщина моделируемого потенциального барьера, d – период решетки.

Проведено численное моделирование динамики процесса рассеяния на решетке дельта-барьеров гауссовых волновых пакетов с разными спектральными ширинами и положениями относительно полосы пропускания решетки. Если спектрально узкий пакет возбуждает пороговое долгоживущее квазистационарное состояние, то распад возбуждения в решетке проходит по экспоненциальному временному закону, причем время жизни, оцененное по мнимой части полюсов амплитуды рассеяния с погрешностью менее 1% близко к значению τ_R^* , полученному из расчета вероятности $P(t)$ нахождения электрона в решетке. При возбуждении пакетом двух или более пороговых квазистационарных состояний в решетке формируется сложная структура возбуждения с несколькими максимумами, между которыми происходит перекачка интенсивности, причем при достижении границ происходит периодическая эмиссия вторичных пакетов из решетки, частичное внутреннее отражение и осцилляции распадного тока. Построены пространственно-временные диаграммы движения максимумов пакетов вне и внутри решетки и по ним определены групповые скорости пакетов. Величины скоростей движения максимумов $|\Psi(x, t)|^2$ внутри решетки и вне решетки с хорошей степенью точности (в пределах нескольких процентов) совпадают с величинами, рассчитанными по соответствующим аналитическим формулам.

В **разделе 3.2** рассмотрена задача о распаде возбуждения, образованного суперпозицией квазистационарных состояний. Закон распада определяется наиболее долгоживущими квазистационарными состояниями. Изучен распад возбужденного состояния в открытой двухбарьерной структуре. Расчет полюсов амплитуды пропускания дает значение времени жизни возбужденного состояния с погрешностью менее 2%, совпадающее со значением, определенным из зависимости $P(t)$. Показано, что при возбуждении двух квазистационарных состояний распадный ток осциллирует с частотой,

определяемой разностью энергий этих состояний.

В **разделе 3.3** изучено прохождение стационарных электронных волн и волновых пакетов через двойные зеркально-симметричные сверхрешетки. Подробно изучены две модели: в одной потенциальная энергия электрона аппроксимирована кусочно-постоянной функцией (с параметрами сверхрешетки Si/CaF_2), в другой – равноотстоящими δ -функциями. Проведен анализ перестройки полос пропускания двойной сверхрешетки при изменении параметров, не нарушающем её зеркальную симметричность. Показано, что в каждой полосе имеется пара смежных резонансных пиков единичной прозрачности, которые могут сближаться, сливаться, а величина результирующего пика может уменьшаться вплоть до исчезновения (коллапс резонансов прозрачности). Показано, что увеличение отношения α мощности барьера второй внутренней подрешетки к мощности барьера первой подрешетки приводит к смещению пиков прозрачности, положения которых определяются нулями амплитуды отражения r . Для двойной симметричной сверхрешетки дельта-барьеров с произвольным N выведено уравнение, определяющее энергии резонансов и обобщающее результат, полученный для трехбарьерной структуры¹. При рассеянии волнового пакета на симметричной двойной сверхрешетке в условиях коллапса время жизни разных квазистационарных состояний в полосах пропускания имеет разную зависимость от α . Если при прохождении волнового пакета возбуждаются квазистационарные состояния, соответствующие неколлапсирующим резонансам, то с увеличением α время жизни этих состояний увеличивается. Если же возбуждаются квазистационарные состояния в области коллапсирующих пиков, то с увеличением α время жизни таких состояний уменьшается.

В **разделе 3.4** рассмотрена задача о рассеянии волнового пакета периодической решеткой конечной длины, находящейся в электрическом поле,

¹ Горбачевич А.А., Журавлев М.Н., Капаев В.В. Коллапс резонансов в полупроводниковых гетероструктурах как переход с нарушением симметрии в открытой квантовой системе // ЖЭТФ. 2008. Т.134. № 2(8). С.338-353.

при учете возбуждения квазистационарных состояний в ней. Предварительно решена задача Штурма-Лиувилля при нулевых граничных условиях и проведен анализ перестройки стационарных состояний электрона в одномерной решетке потенциальных барьеров во внешнем однородном поле $V(x) = Fx$. При кусочно-постоянной аппроксимации $V(x) = Fd[x/d]$ и применении приближения сильной связи исследованы решетки для ($N \gg 1$), вычислена энергетическая плотность состояний, построены качественные диаграммы локальной устойчивости решений, получены аналитические оценки границ пространственной локализации электрона в решетке для произвольных стационарных состояний, изучена перестройка состояний при изменении внешнего электрического поля. Применение гибридного алгоритма позволило исследовать периодическую решетку в электрическом поле без использования приближения сильной связи и кусочно-постоянной аппроксимации потенциальной энергии электрона. Структура энергетической плотности состояний электронов в решетке $g(E) = dn/dE$ сильно изменяется в зависимости от приложенного к решетке напряжения V : при $|qV| < 2\Delta E_{s0}$, (где q – элементарный заряд, ΔE_{s0} – полуширина s -й энергетической зоны в отсутствие внешнего поля) состояния можно подразделить на локализованные (краевые) и делокализованные (зонные); при $|qV| > 2\Delta E_{s0}$ все состояния локализованные, но вблизи порогов полосы остаются краевые состояния, а в середине полосы образуются лестничные Ванье-Штарковские состояния, плотность состояний которых не зависит от энергии. Разработанный алгоритм применен для расчета тока через короткопериодную сверхрешетку Si/CaF_2 в электрическом поле. Решетка является интерференционным фильтром и перераспределяет энергию распространяющегося волнового возбуждения, усиливая одни спектральные компоненты и подавляя другие в прошедших, отраженных и захваченных решеткой импульсах. Последний тип импульсов может существовать достаточно долго после ухода основных отраженного и прошедшего импульсов. Исследованы полюсы амплитуды рассеяния в комплексной энергетической плоскости и рассеяние волновых пакетов разного спектрального состава и

положения в зависимости от приложенного внешнего поля. Показано, что при большом значении внешнего поля, такого, что $|qV| > 2\Delta E_{s0}$ туннельная прозрачность решетки резко уменьшается, и пакет практически полностью отражается от решетки, несмотря на сильное тянущее поле. Поведение импульса внутри решетки зависит от положения спектрального максимума E_c пакета относительно полосы пропускания, в частности, пакет, спектрально расположенный вблизи верхнего порога полосы, проникает достаточно глубоко в решетку (до классической точки поворота), образуя внутри решетки долгоживущее возбуждение. Время жизни этого возбуждения определяется соответствующими полюсами, близкими к вещественной оси в сильном поле. Отметим, что подавляется когерентный механизм переноса пакета, при наличии неупругого рассеяния в решетке будет происходить последовательный перенос возбуждения по спектральным ступенькам лестницы Ванье-Штарка.

Четвёртая глава посвящена изучению электронных переходов в фотоэлектрохимической ячейке (ФЭХЯ) нового поколения солнечных элементов на органических красителях, предложенной М. Гретцелем². Исследование процессов переноса заряда в таких устройствах позволяет указать пути повышения эффективности солнечных элементов.

В **разделе 4.1** дано описание ФЭХЯ, принцип действия которого заключается в разделении заряда на границе между полупроводниковой наночастицей и молекулой сенсбилизатора (хромофором). Описаны основные процессы электронного переноса после оптического возбуждения хромофора: обратный излучательный переход электрона (флуоресценция), инжекция фотовозбужденного электрона в наночастицу, перенос электрона через слой наночастиц в коллектор.

В **разделе 4.2** на основе подхода³ рассмотрено температурное ушире-

² O'Regan B., Gratzel M. A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films // Nature. 1991. V.353. N.6346. P.737-739.

³ Осадько И.С. Теория формы однородной оптической полосы примесного центра в аморфных и кристаллических средах // ЖЭТФ. 1986. Т.90. №4. С.1453-1465. Осадько И.С. Селективная спектроскопия одиночных молекул. М.: Физматлит, 2000. 320 с.

ние спектральной линии флуоресценции хромофора, обусловленное взаимодействием молекулы с колебательными возбуждениями в неупорядоченной среде. Показано, что в аморфных средах в низкотемпературной области определяющий вклад в уширение спектральной линии флуоресценции и, соответственно, в увеличение скорости перехода из возбужденного в основное состояние вносит взаимодействие хромофора с возбуждениями в двухуровневых системах наряду с возбуждениями фононной подсистемы.

В **разделе 4.3** предложена модель бездиссипативного прохождения электронного волнового пакета от хромофора через систему потенциальных барьеров, разделяющих наночастицы, до коллектора. Для объяснения экспериментально наблюдаемых двух стадий распада электронного возбуждения – сначала быстрого (десятки фемтосекунд), а затем более медленного (десятки, сотни пикосекунд) – предложенная модель позволяет выделить основные факторы, влияющие на перенос электрона и оценить значения временных характеристик этого процесса. Изучены вероятности нахождения электрона в хромофоре ($P_1(t)$) и в системе «хромофор–слой наночастиц» ($P_N(t)$). Вероятность $P_1(t)$ характеризуется начальным быстрым распадом, переходящим затем в медленное убывание, которое сопровождается колебаниями, обусловленными интерференцией спектральных компонент волнового пакета при их отражении от потенциальных барьеров, ограничивающих наночастицы (обратный электронный перенос). Вероятность $P_N(t)$ имеет начальный горизонтальный участок, соответствующий прохождению волновым пакетом слоя наночастиц, который затем сменяется относительно быстрым спадающим участком, отражающим уход основного тела пакета в коллектор, и относительно медленным участком, формируемым долгоживущими и распространенными на всю цепочку наночастиц квазистационарными состояниями. Показано, что большое влияние на динамику волнового пакета оказывают размеры и разброс размеров наночастиц, а также их количество в транспортной цепочке от молекулы фотосенсибилизатора до коллектора. Для системы одинаковых по размеру наночастиц существует оптимальный размер, при котором реализуется наиболее быстрый уход

электрона в коллектор.

В **пятой главе** рассмотрены задачи расчета нестационарного тока из квантово-размерных многослойных гетероструктур.

В **разделе 5.1** описано устройство на основе двойной квантовой ямы с туннельно-прозрачными барьерами, в которой возможно образование дублетов близко лежащих квазистационарных состояний. Показано, что в такой структуре после возбуждения состояний дублета возникают осцилляции распадного тока на разностной частоте этого дублета. Частота и длительность осцилляций тока определяются положением полюсов амплитуды отражения $r(E)$. При характерных для наноэлектроники параметрах двойной ямы частота осцилляций тока лежит в гига- и терагерцовом диапазоне, продолжительность осцилляций по порядку величины ограничена обратной шириной квазистационарного состояния в дублете $\tau_R^* \gg \omega^{-1}$.

В **разделе 5.2** проводится дальнейшее развитие идеи получения гармонической составляющей нестационарного тока из гетероструктуры. Построена теория нестационарной фотоэмиссии, основанная на применении метода матрицы плотности, используемого при расчетах быстро протекающих квантовых кинетических процессов, обобщающая трехшаговую теорию фотоэмиссии⁴. Элементы матрицы плотности находятся из решения квантового кинетического уравнения. Рассчитаны недиагональные элементы матрицы плотности, зависящие от времени и учитывающие различные неупругие процессы, ответственные за электронную релаксацию. Плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ фотоэмиссии выражается через элементы матрицы плотности $\rho_{p,p'}^{(2)}(t)$ во втором порядке теории возмущений по электромагнитному полю и через матричные элементы плотности стационарного тока $\mathbf{j}_{p',p}(\mathbf{r})$ как

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 2 \sum_{p,p'} \rho_{p,p'}^{(2)}(t) \mathbf{j}_{p',p}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Фотоэмиссионный ток равен сумме (6) по стационарным состояниям p и p' непрерывного спектра задачи рассеяния, принадлежащим регистрируемой

⁴ Solid-State Photoemission and Related Methods. Theory and Experiment. / Eds. Schattke W., Van Hove M.A. Wiley-VCH. 2003. 515 p.

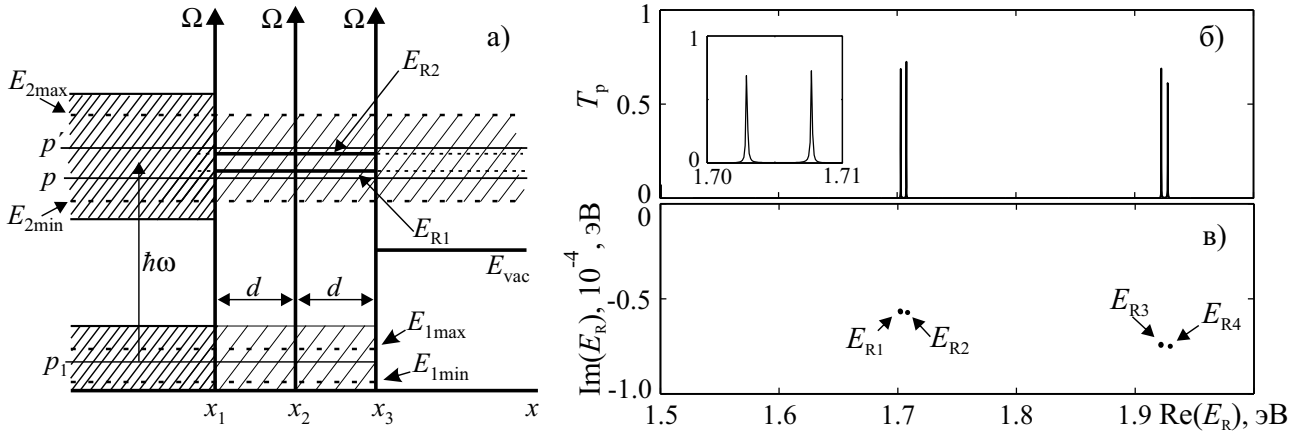


Рис. 2. а) Схема фотоэмиттера с поверхностной гетероструктурой, б) спектр коэффициента прохождения T_p через гетероструктуру; в) надвакуумные низкоэнергетические дублеты полюсов амплитуд рассеяния в комплексной энергетической плоскости $E_{R1,R2}$ и $E_{R3,R4}$

полосе энергии фотоэлектронов выше вакуумного уровня (рис.2,а). Элементы матрицы плотности $\rho_{p,p'}^{(2)}(t)$ несут информацию о фотовозбуждении электронов из глубоко лежащих стационарных состояний, а также о процессах неупругого рассеяния. Численный расчет тока фотоэмиссии проведен для одномерной модели (рис.2,а). Амплитуда прохождения через гетероструктуру t_p и матричные элементы тока $j_{p'p}$ имеют полюсные особенности в нижней полуплоскости комплексной энергии электрона при значениях энергии $E_R = \text{Re}E_R + i\text{Im}E_R$. С этими полюсами связано положение узких пиков коэффициента прохождения через гетероструктуру T_p (рис.2,б,в). Проведено численное моделирование тока фотоэмиссии при импульсном освещении светом длительностью t_0 . Показано, что при этом могут возбуждаться надвакуумные близлежащие квазистационарные состояния, характеристики которых определяются полюсами амплитуд рассеяния. Времена жизни квазистационарных состояний дублетов $\tau_{R1} \approx \hbar/|\text{Im}E_{R1}|$, $\tau_{R2} \approx \hbar/|\text{Im}E_{R2}|$. Разность энергий дублетов $\Delta E_{R12} = \text{Re}E_{R2} - \text{Re}E_{R1}$ эВ определяет разностную частоту $\nu_{12} = \Delta E_{R12}/2\pi\hbar$ и период $T_{12} = 1/\nu_{12}$ осцилляций фототока. Осцилляции тока будут эффективно наблюдаться при выполнении неравенств $\tau_{R1}, \tau_{R2}, \tau_p \gg T_{12}$, где $\tau_p = \hbar/\gamma_p$ – время релаксации электронов, определяемое неупругим рассеянием. При $0 < t < t_0$ значение тока возрастает и осциллирует. Определенные из (6) частота и период осцилляций близки к

значениям ν_{12} и T_{12} с погрешностью менее 4% (рис. 3,а). При увеличении длительности импульса накачки t_0 ток асимптотически стремится к стационарному значению j_{st} объемного фототока. При $t > t_0$, после прекращения

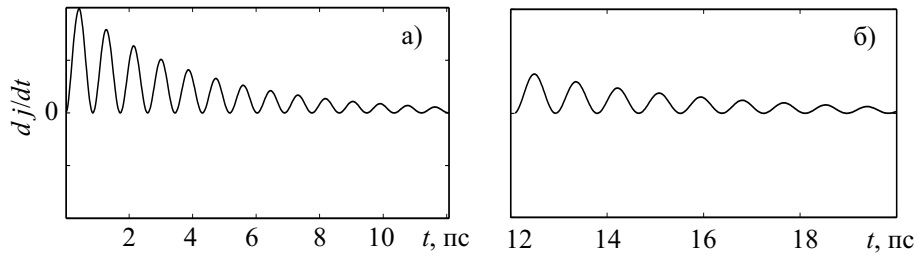


Рис. 3. Производная плотности тока по времени а) после включения импульса накачки и б) после выключения импульса накачки

действия светового импульса $E(t) = 0$, фотоэмиссионный ток определяется смешиванием и распадом заселившихся при накачке квазистационарных состояний в гетероструктуре. Он убывает до нуля, испытывая осцилляции почти той же разностной частоты, что и при накачке (рис. 3,б). Показано, что для генерации разностной гармонической составляющей переменного фототока длительность импульсов накачки должна быть порядка времени релаксации, а интервалы между ними – порядка времени жизни квазистационарных состояний. Характеристики тока определяются параметрами гетероструктуры. Для толщин слоев 1–10 нм и высоты барьеров 0.5–2.5 эВ можно обеспечить времена жизни квазистационарных состояний $10^{-2} - (3 \times 10^2)$ пс и генерируемые разностные частоты для них $10^{11} - 10^{14}$ Гц. Варьируя параметры поверхностной гетероструктуры, можно изменять времена жизни τ_{R1}, τ_{R2} и разностные частоты ν_{12} дублетных квазистационарных состояний, что меняет форму кривых зависимости фототока от времени, анализ этих кривых может дать информацию о значениях времен релаксации $\tau_p = \hbar / \gamma_p$ возбужденных электронов в фотокатоде.

В **шестой главе** изучаются пространственно-неоднородные слоистые структуры, в которых могут существовать связанные волны, это магнитоупругие волны в магнетиках и связанные u -, v -волны боголюбовских элементарных возбуждений в сверхпроводниках.

Ранее теоретически и экспериментально изучалось распространение маг-

нитоупругих волн в неограниченных объемных⁵ и планарных средах⁶, в сверхрешетках⁷. В **разделах** 6.1–6.3 излагается развитая нами теория распространения упругих волн в структурах, состоящих из чередующихся магнитных (M) и немагнитных (D) слоев конечной длины в области МАР, получены спектры прохождения и отражения ультразвука, изучено рассеяние ультразвукового волнового пакета M -слоем.

В **разделе** 6.1 представлены результаты исследования дифракции монохроматической с частотой ω правополяризованной ультразвуковой волны, нормально падающей на ферромагнитный слой в области магнитоакустического резонанса (МАР). Ферромагнетик намагничен до насыщения перпендикулярно плоскости слоя. Связанные магнитоупругие волны описываются системой уравнений, состоящей из уравнения Ландау-Лифшица для намагниченности m и волнового уравнения для упругой волны u в линейном приближении. Из решения этой системы получены четыре магнитоупругих ветви $k_{1,2,3,4}$. В отсутствие магнитоупругого взаимодействия ($B_2 = 0$) пересечение спинволновой k_{10} и упруговолновой k_{20} ветвей определяет координату k_0, ω_0 нижней точки МАР.

В M -слое магнитоупругие волны представлены суперпозицией четырех плосковолновых компонент, трансфер-матрица через слой четырехмерна, в немагнитных средах распространяется только двухкомпонентная упругая волна. Для построения редуцированной двухмерной матрицы перехода упругой волны через M -слой учтены условия закрепления спинов на границах раздела слоев, позволяющие получить необходимые соотношения между парциальными амплитудами магнитоупругих волн. Получены аналитические выражения для амплитуд рассеяния $r(\omega)$ и $t(\omega)$ упругой волны при различных условиях закрепления спинов на границах раздела

⁵ Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. М.: Наука, 1967. Гуревич А.Г., Мелков Г.А. Магнитные колебания и волны. М.: Физматлит, 1994.

⁶ Гуляев Ю.В., Зильберман П.Е. Магнитоупругие волны в пластинах и пленках ферромагнетиков // Известия вузов. Физика. 1988. Т. 31. С. 6-23.

⁷ Ignatchenko V.A., Laletin O.N. Magnetoelastic ground state and waves in ferromagnet-nonmagnetic dielectric multilayer structures // Phys. Rev. B. 2007. V.76. N.10. P. 104419

слоев. Ширина области МАР характеризуется параметром относительной когерентной связи $l = l(\omega)$ между упругими и магнитными колебаниями, который в резонансе по величине близок к единице и быстро спадает вне области резонанса. Показано, что при прохождении ультразвуковой волны через M -слой в области МАР возбуждается локализованная спиновая волна, при этом реализуются условия антирезонанса Фано⁸. В спектре T этот эффект проявляется в наличии узких линий полного отражения соседствующих с более широкими максимумами (рис. 4, г). Аналогичная структура спектра может возникать при отражении электронной волны в электронном волноводе с примесью конечных размеров⁹. В модельных расчетах использованы физические параметры железо-иттриевого граната (ЖИГ). Исследованы случаи тонкого и толстого слоя толщины a по сравнению с длиной ультразвуковой волны λ . В тонком слое $a \sim \lambda$ узкие линии отражения в области МАР становятся более широкими по отношению к таким же линиям вне резонанса. Учет затухания для тонких слоев ЖИГ практически не влияет на коэффициенты отражения и пропускания. В толстом слое $a \gg \lambda$ в области МАР, как правило, формируется полоса сильного отражения. Ширина и количество линий отражения определяются величиной магнитоупругой связи, толщиной M -слоя, параметрами затухания волн в структуре и расстоянием по частоте от точки МАР. Интерференция волн в многослойных структурах приводит к эффективному усилению влияния магнитоупругого взаимодействия на рассеяние упругих волн, как ранее было отмечено в работе¹⁰.

В **разделе 6.2** представлены результаты исследования дифракции нормально падающей монохроматической правополяризованной ультразвуковой волны на магнитной сверхрешетке конечной длины в области нижнего

⁸ Miroschnichenko A.E., Flach S., Kivchar Y.S. Fano resonances in nanoscale structure // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82. N.3 P.2257-2298.

⁹ Ким Ч.С., Сатанин А.М., Джо Ю.С., Косби Р.М. Коллапс резонансов в квазиодномерных квантовых каналах // ЖЭТФ. 1999. Т.116. №1. С.263-275.

¹⁰ Игнатченко В.А., Кузьмин Е.В. Спектр связанных магнитоупругих колебаний в тонкой магнитной пленке // ЖЭТФ. 1964. Т.47. №11. С.1814-1821.

МАР в случае, когда M -слои намагничены до насыщения вдоль направления оси сверхрешетки. Получены рекуррентные формулы расчета трансфер-матрицы $M(x_{N+1}, x_1)$ через структуру, амплитуды прохождения $t(\omega)$ и отражения $r(\omega)$, а также выражения для связанных волновых полей в M -слоях и упругих полей в D -слоях структуры при различных условиях закрепления спинов на границах раздела слоев. Показано, что при прохождении ультразвука с частотой, близкой к частоте МАР, усиливаются резонансные эффекты, определяемые магнитоупругой связью в M -слоях и рассеянием волн на границах раздела магнитных и немагнитных сред. Увеличение толщины каждого M -слоя приводит к увеличению густоты и смещению влево по частоте узких линий полного отражения в спектре коэффициента пропускания ультразвука в любом частотном интервале. Показано, что затухание приводит к уменьшению ультразвуковой прозрачности структуры, тогда как на отражение ультразвука затухание практически не оказывает влияние. Изучено влияние величины внешнего магнитного поля на коэффициент прохождения ультразвуковой волны T в области МАР при фиксированных остальных параметрах многослойной магнитной сверхрешетки. Отмечено, что согласованный подбор числа и толщины M - и D -слоев в многослойных структурах может позволить создать устройства магнитной электроники, пропускающие или отражающие ультразвуковые волны в заданных спектральных полосах вблизи МАР, положение которых зависит от значения внешнего магнитного поля.

В **разделе 6.3** рассматривается задача о рассеянии упругого правополяризованного волнового импульса, нормально падающего на ферромагнитный слой, намагниченный перпендикулярно его плоскости. Волновое поле ультразвукового импульса в момент времени t можно представить в виде

$$u(x, t) = \int c(\omega) e^{-i\omega t} u(\omega, x) d\omega, \quad (7)$$

где $c(\omega)$ – спектральная функция, центрированная на частоте Ω_0 со спектральной шириной равной v/σ , v – скорость максимума пакета вне M -слоя, σ – пространственная ширина пакета. Вычисления стационарных волно-

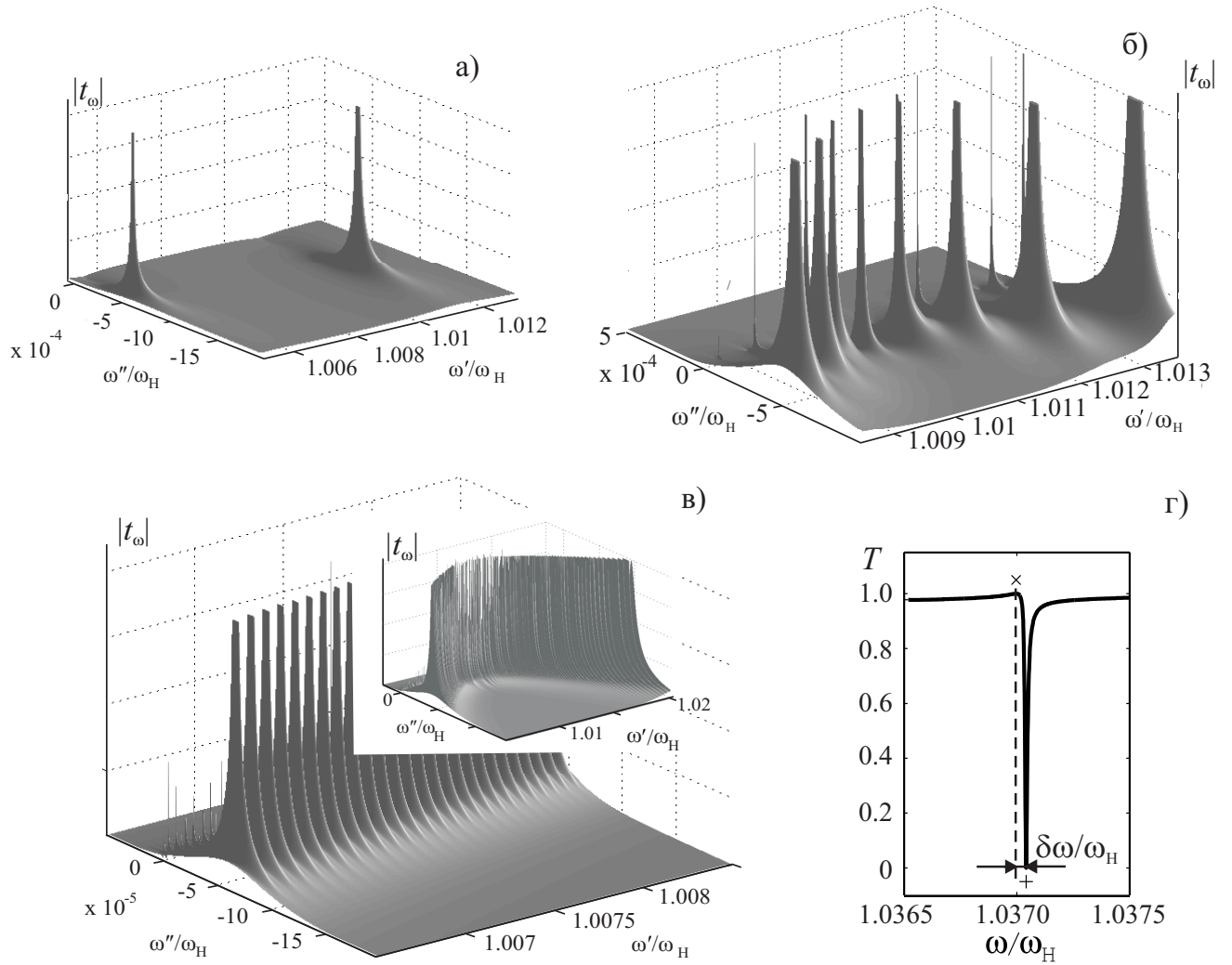


Рис. 4. Поверхность $|t|$ в области МАР в нижней комплексной полуплоскости частот для а) тонкого M -слоя, б) слоя промежуточной толщины ($a > \lambda$), в) толстого M -слоя, г) фрагмент спектра пропускания $T(\omega)$ ультразвуковой волны через тонкий M -слой

вых полей $u(\omega, x)$ и $m(\omega, x)$ во всей пространственной области проведены с помощью метода трансфер-матрицы (**раздел 6.1**). Рассмотрены волновые пакеты со спектральным максимумом вблизи нижней точки МАР. При $B_2 = 0$ амплитуда $t(\omega)$ имеет полюсы, которые являются решениями уравнения $\tau_n^{-1} = 0$, где $\tau_n^{-1} = \cos k_{n0}a - \frac{i}{2}(k_{n0}/k + k/k_{n0}) \sin k_{n0}a$, $n = 1, 2$ и лежат в нижней полуплоскости комплексной частоты при $\omega_{ja} = \omega'_{ja} + i\omega''_{ja}$. При увеличении толщины слоя a эти полюсы, сгущаясь, смещаются влево и к действительной оси. Полюсы ω_{ja} лежат точно под нулями функции $\sin k_n a$ на акустической ветви, которые определяют частоты полного резонансного

пропускания упругих волн. Уравнение $\sin k_n a = 0$ на спинволновой ветви (ниже точки МАР ω_0 ей соответствует k_2 , а выше k_1) есть условие образования стоячих спиновых волн (полуволновой слой). При $B_2 \neq 0$ у амплитуд A_n , $r(\omega)$ и $t(\omega)$ имеется два типа полюсов $\omega_{R\nu}$, совпадающих с нулями знаменателя. Полюсы первого типа происходят от параметров $\tau_n^{-1} = 0$ и связаны с эволюцией полюсов ω_{ja} квазиакустической ветви (квазиупругие резонансы). Полюсы второго типа появляются за счет их отделения от нулей $\sin k_n a$ на спинволновой ветви и схода в нижнюю полуплоскость (квазиспинволновые резонансы), при удалении от точки бифуркации нули $t(\omega)$ продолжают оставаться на реальной оси, а отделившиеся полюсы с ростом B_2 отходят вниз. Показано, что спектральный вклад полюса $\omega_{R\nu}$ пропорционален значению групповой скорости на соответствующей ветви. В области нижнего МАР групповая скорость упругих волн $\sim v_t$ много больше групповой скорости спиновых волн $\sim 2\eta\omega_0/v_t$, поэтому квазиакустические полюсы значительно мощнее квазиспинволновых полюсов. При изменении толщины слоя a и напряженности магнитного поля H полюсы обоих типов движутся в гиперпространстве $\{\omega', \omega'', a, H\}$ по своим траекториям. С ростом H область МАР перемещается к более высоким частотам и коротким длинам волн. Показано, что изменяя толщину a , напряженность поля H , а также параметры пакета Ω_0 и σ , можно наблюдать возбуждение и эволюцию вторичных волновых структур вне и внутри пластины, связанных с возбуждением квазистационарных состояний в пластине. В зависимости от толщины M -слоя определены три режима.

а) Тонкий M -слой толщины $a \sim 2\pi/k_0$. Проведен расчет квазиспинволновых полюсов в области МАР (рис. 4,а). При рассеянии на пластине происходит отражение и прохождение импульса, при этом возможно возбуждение квазистационарного состояния, распадающееся по экспоненциальному закону. Время жизни этого состояния с погрешностью менее 3% совпадает с величиной, определенной по мнимой части полюса $\tau_R = 2\pi/\omega''$.

б) Слой промежуточной толщины $a \sim 2\pi/(k_1(\omega_0) - k_2(\omega_0))$. В этом случае в области МАР квазиакустические полюсы, локализованные вдоль

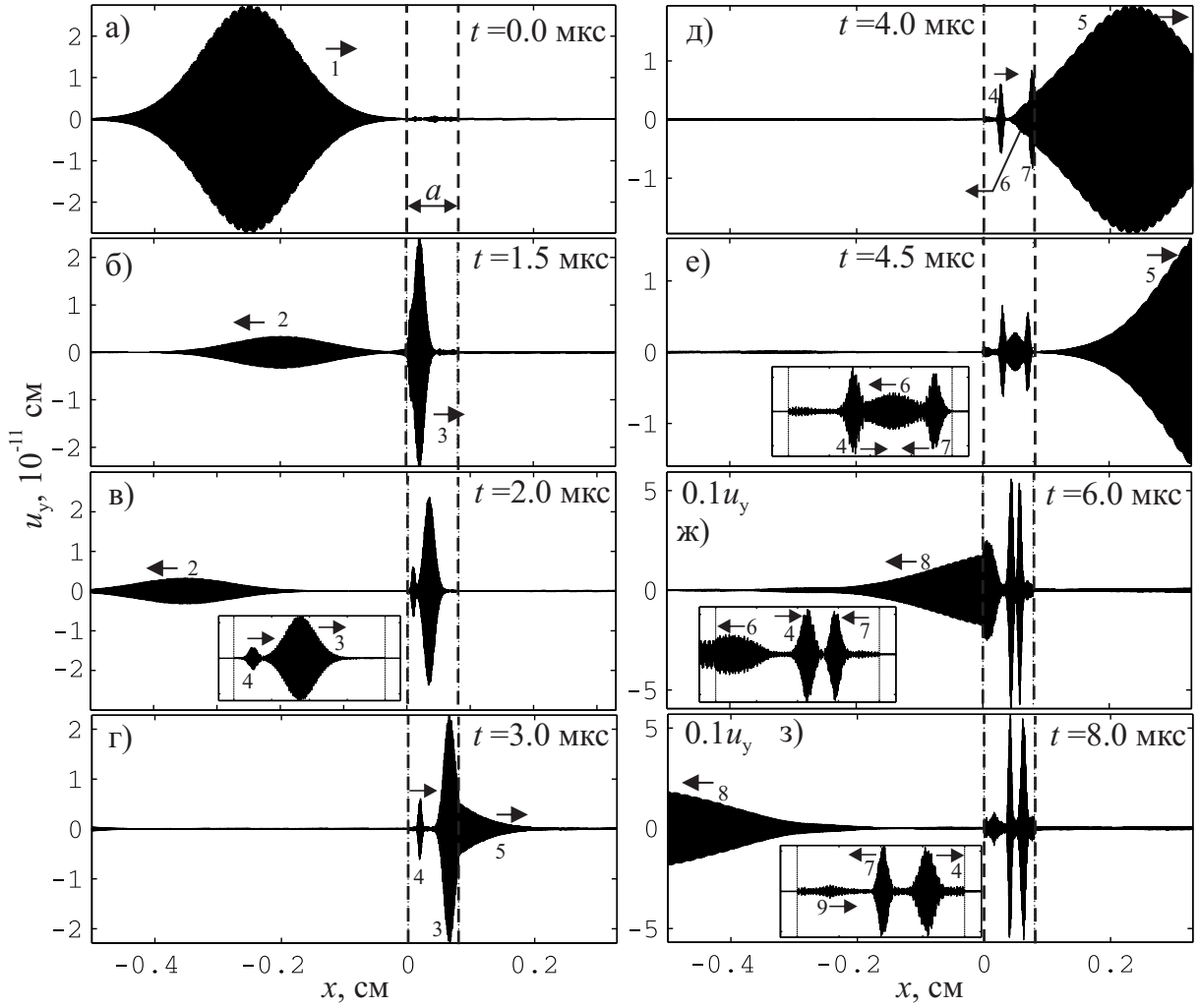


Рис. 5. Процесс рассеяния волнового пакета толстым M -слоем ($\Omega_0/\omega_H = 1.0075$, $\sigma = 0.075$ см, $x_0 = -0.25$ см). Границы пластины обозначены вертикальными пунктирами.

дуги (рис. 4,б), приближаются к реальной оси настолько, что начинают определять рассеивающие свойства системы и структуру квазистационарных состояний. Квазиспинволновые полюсы расположены как около квазиакустических полюсов, так и недалеко от реальной оси вблизи нулей $|t(\omega)|$. Исследовано поведение полюсов при изменении магнитного поля и рассеяние волнового пакета при его разном спектральном положении относительно центра МАР. Показано, что при возбуждении двух спектрально близких резонансов могут возникнуть осцилляции, приводящие к пульсациям ультразвукового сигнала на разностной частоте $\omega'_{R2} - \omega'_{R1}$.

в) Толстый M -слой $a \gg 2\pi / (k_1(\omega_0) - k_2(\omega_0))$. По сравнению с предыдущим случаем квазиакустические полюсы еще сильнее сгущаются, об-

разуя дугообразный хребет, приближающийся к реальной оси в области МАР (рис. 4,в). В этой области групповые скорости на обеих ветвях меньше скорости упругих волн v , поэтому квазиакустические полюсы уменьшаются по мощности и смешиваются с квазиспинволновыми полюсами, нули $t(\omega)$ становятся реже, а участки вокруг них шире, что может привести к уширению линий полного отражения. При таком сгущении полюсов спектрально узким пакетом перекрывается много полюсов и нулей $t(\omega)$. Изучено прохождение волнового пакета (7) через M -слой в области МАР. Внутри слоя пакет при каждом отражении от границы раздела разбивается на два импульса, движущихся со скоростями, близкими к групповым скоростям v_{g1} и v_{g2} на двух спектральных ветвях при частоте спектрального центра пакета, которые значительно меньше фазовой скорости упругой волны в M -слое v_t и вне M -слоя v . Показано, что скорости максимумов хорошо разрешенных импульсов внутри слоя практически равны указанным групповым скоростям (вычислительная погрешность меньше 1%). Расчет относительной интенсивности упругого поля внутри M -слоя показывает, что при внутренних отражениях может существенно увеличиться энергия упругих колебаний в пленке. Увеличение происходит за счет перекачки энергии из магнитной подсистемы в упругую подсистему.

В **разделе 6.4** на основе метода четырехмерных трансфер-матриц изучаются пространственно-неоднородные сверхпроводящие системы. Волновые поля u и v элементарных возбуждений в сверхпроводящем слое описываются системой уравнений Боголюбова - де Жена¹¹. Для однополостной поверхности Ферми радиуса $\hbar k_{FX}$, где $X = N, S_1, S_2$, обладающей центром инверсии, характеристическое уравнение системы уравнений Боголюбова - де Жена имеет четыре корня $k_{1,2,3,4}$, а общее решение для u и v полей есть суперпозиция четырех компонент вида $A_j \exp(ik_j x)$. Вектор-столбец состояния $\Psi(x) = (u, u', v, v')^T$ в произвольной точке x связан с решением $\Psi(a)$ в некоторой точке a соотношением (2). Для стационарной задачи андреев-

¹¹ Свидзинский А.В. Пространственно-неоднородные задачи теории сверхпроводимости. М.: Наука, 1982. 312 с.

ского отражения в несимметричном S_1NS_2 переходе, с учетом различных поперечных импульсов Ферми в слоях S_1, N, S_2 , построена 4-мерная трансфер-матрица $M(a, 0)$ перехода через N -слой, толщиной d , получено спектральное уравнение для энергии квазичастиц $\epsilon = \epsilon(\Delta_1, \Delta_2, k_{FN}, k_{FS_1}, k_{FS_2})$, где Δ_1, Δ_2 – потенциалы спаривания в S_1 и S_2 слоях. Показано, что в андреевском приближении $k_{FN} = k_{FS_1} = k_{FS_2}$ спектральное уравнение для ϵ переходит в уравнение, полученное в работе¹², а для симметричного перехода в уравнение, полученное в работе¹³. Проведен численный расчет ϵ в зависимости от величины параметра асимметрии импульсов Ферми $\delta k_F = (k_{FN}/k_{FS} + k_{FS}/k_{FN})/2 - 1$. В зависимости от величины параметра асимметрии δk_F и фазы φ изучены асимптотики спектра ϵ и показано, что с увеличением расстройки δk_F ослабевает фазовая зависимость ϵ .

Основные результаты и выводы диссертации

Диссертация посвящена моделированию стационарных и нестационарных волновых процессов в пространственно-неоднородных структурах. В работе исследовалась коллинеарная дифракция волн различной природы, как в квантовых, так и в классических квазиодномерных системах.

1. Для волновых уравнений с переменными коэффициентами построен рекуррентный алгоритм вычисления одношаговых трансфер-матриц. Изучены спектральные свойства таких матриц, установлена их численная устойчивость, определены локальные и глобальные погрешности расчета трансфер-матрицы. Построенный алгоритм является частью гибридного алгоритма расчета волновых полей, энергетических спектров, полос пропускания и других характеристик дифракции волн в многослойных системах.

2. Показано, что волновой пакет при рассеянии на периодической решетке может сформировать долгоживущие квазистационарные состояния. Изучены характеристики таких резонансных возбуждений в зависимости

¹² Куплевацкий С.В., Фалько И.И. Андреевские состояния индуцированные током в сверхпроводящих контактах // ФНТ. 1991. Т.17. N.8. С.961-970.

¹³ Кулик И.О. Пространственное квантование и эффект близости в S-N-S-контактах // ЖЭТФ 1969. Т.57. №.11. С.1745-1758.

от их положения в полосе пропускания и длины решетки. Спектральный состав и положение волнового пакета определяют различные сценарии эволюции квазистационарных состояний во время и после прохождения волнового пакета. Получены аналитические формулы для описания полюсов амплитуд рассеяния. Показано, что время жизни пороговых квазистационарных состояний пропорционально кубу длины решетки, а время жизни квазистационарных состояний в центральной части полосы пропускания пропорционально первой степени длины решетки. В задаче о рассеянии волнового пакета на решетке конечной длины, находящейся в сильном электрическом поле, изучена возможность инжекции электрона в решетку и эволюция волнового пакета в зависимости от внешнего силового поля.

3. Показано, что в симметричных двойных сверхрешетках возможен коллапс резонансов единичной прозрачности. Получено уравнение, определяющее максимумы туннельной прозрачности для решетки с дельта-барьерами, изучено движение нулей амплитуды отражения до и после коллапса, причем моменту начала коллапса соответствует сход нулей с действительной оси в комплексную энергетическую плоскость.

4. Для периодической решетки конечной длины, помещенной в электрическое поле, проведен численно-аналитический расчет волновых функций стационарных состояний электрона при различных значениях энергии электрона и напряженности внешнего поля. Построены диаграммы локальной устойчивости волновых функций этих состояний. Изучена перестройка однозонной плотности состояний в зависимости от величины внешнего электрического поля. Показано, что при усилении поля увеличивается число краевых локализованных состояний зоны, а при превышении определенного критического значения напряженности поля в середине зоны формируется горизонтальное плато плотности состояний, соответствующее образованию спектральной лестницы Ванье-Штарка в этой области энергий.

5. Исследованы два основных электронных процесса в фотоэлектронхимической ячейке Гретцеля – излучательный переход из возбужденного

электронного состояния в основное состояние и инжекция электрона в систему полупроводниковых наночастиц. Получены асимптотические выражения для полуширины бесфононной линии флуоресценции при учете взаимодействия с низкоэнергетическими возбуждениями в туннельных двухуровневых системах аморфной среды в низкотемпературной области. Обнаружено существенное влияние упорядоченности нанослоя и дисперсии размеров наночастиц на скорость процесса переноса. Показано, что после оптического возбуждения вероятность $P(t)$ нахождения электрона в молекуле красителя сначала быстро уменьшается в диапазоне десятков фемтосекунд, а затем медленно убывает в диапазоне десятков и сотен пикосекунд, последний участок обусловлен распадом долгоживущих квазистационарных состояний в нанослое и эмиссией в коллектор.

6. Показано, что при распаде квазистационарных состояний в поверхностной двойной квантовой яме возникают осцилляции распадного тока с частотой, соответствующей разности энергий этих состояний. Вычислены осцилляции нормальной составляющей фотоэмиссионного тока, возникающие при возбуждении электронных состояний подложки фотокатода и туннелировании электронов через поверхностную трехбарьерную гетероструктуру. Показано, что фототок осциллирует на разностной частоте дублета квазистационарных состояний при включении и выключении импульса накачки.

7. Изучено поведение коэффициента прохождения монохроматической правополяризованной ультразвуковой волны через один M -слой и через сверхрешетку «ферромагнетик/немагнетик» конечной длины в области МАР. Показано, что при прохождении ультразвука с частотой, близкой к частоте МАР M -слоев, в сверхрешетке усиливаются резонансные эффекты, определяемые магнитоупругой связью в магнитных слоях и рассеянием волн на границах раздела магнитных и немагнитных сред. Увеличение толщины каждого M -слоя приводит к увеличению густоты узких линий полного отражения в спектре коэффициента пропускания ультразвука. Кроме того, вблизи МАР возникают антирезонансы Фано, вызываемые взаимодействием

ем рассеиваемой упругой волны со спиновыми волнами, локализованными в магнитных слоях. Затухание волн приводит к уменьшению ультразвуковой прозрачности структуры, а на отражение ультразвука оказывает меньшее влияние. Согласованный подбор числа и толщины магнитных и немагнитных слоев в многослойных структурах может позволить создать устройства, пропускающие или отражающие ультразвуковые волны в заданных спектральных полосах вблизи МАР, положение которых зависит от значения внешнего магнитного поля. Проведен анализ резонансного взаимодействия правополяризованных ультразвуковых импульсов со спиновыми возбуждениями ферромагнитной пластины в области МАР. Выделены два типа полюсов. Резонансные свойства тонких пластин определяются, в основном, полюсами спинволнового происхождения, а свойства толстых пластин смешиванием акустических и спинволновых полюсов. Проведенные численные расчеты распространения ультразвуковых правополяризованных импульсов через ферромагнитные пластины показали, что в пластинах при прохождении пакетов могут возбуждаться квазистационарные состояния и вторичные импульсы, обусловленные интерференцией и перекачкой энергии между упругой и спиновой подсистемами.

8. Проведен расчет спектра локализованных андреевских состояний в несимметричном S_1NS_2 переходе с разными поперечными импульсами Ферми в слоях. При увеличении разности поперечных импульсов Ферми в слоях, характеризуемых параметром асимметрии δk_F , ослабевает фазовая зависимость энергии стационарных состояний элементарных возбуждений и при $\delta k_F \gg 1$ эта зависимость исчезает.

Публикации по теме диссертации

1. Osad'ko I.S., Shtygashev A.A. The tunnelon theory of optical dephasing and impurity homogeneous optical band in amorphous solids: finding the two-level system parameters // J.of Luminescence 1987. V.36. P.315-325.
2. Osad'ko I.S., Shtygashev A.A. Theoretical aspects of optical dephasing in polymers and glasses. // J.of Luminescence 1987. V.37. P.255-267.

3. Осадько И.С., Штыгашев А.А. Извлечение информации о туннельных системах стекол и полимеров из данных по низкотемпературному уширению оптических линий // ФТТ. 1987. Т.29, №5. С.1550-1554.
4. Осадько И.С., Штыгашев А.А. Влияние туннельных степеней свободы полимеров и стекол на форму однородной оптической полосы // Оптика и спектроскопия. 1989. Т.66. №1. С.86-91.
5. Пейсахович Ю.Г., Штыгашев А.А. Спектр андреевских состояний в несимметричном SNS-переходе // Физика низких температур. 1999. Т.25. №5. С.455-458.
6. Пейсахович Ю.Г., Штыгашев А.А. Полное отражение ультразвука от ферромагнитной пластины при закреплении спинов на поверхности // ЖЭТФ. 2000. Т.118. №1(7). С.213-222.
7. Shtygashev A.A., Ovchinnikov Yu.E., Shklover V. Simple quantum models of electron injection from a sensitizer molecule to semiconductor nanocrystals // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2003. V.76. P.75-84.
8. Величко А.А., Илюшин В.А., Филимонова Н.И., Штыгашев А.А. Вольт-амперная характеристика сверхрешеток на основе структуры CaF_2/Si // «Актуальные проблемы электронного приборостроения» / Материалы VII международной конференции. 2004. N.2. С.16-19.
9. Пейсахович Ю.Г., Штыгашев А.А. Распад низкоэнергетического квазистационарного состояния в квантовой яме // «Актуальные проблемы электронного приборостроения» / Материалы VIII международной конференции. Новосибирск, 2006. Т.2. С.47-52
10. Peisakhovich Y.G., Shtygashev A.A. The Gauss wave packets scattering on the regular lattice of finite length // «Актуальные проблемы электронного приборостроения» / Материалы VIII международной конференции. Новосибирск, 2006 Т.1. С.19-21.
11. Пейсахович Ю.Г., Штыгашев А.А. Одномерная квантовая механика. Новосибирск: Издательство НГТУ, 2007. 476с.

12. Peisakhovich Yu.G., Shtygashev A.A. Formation of the quasistationary state by scattering of wave packets on a finite lattice // Phys. Rev. B. 2008. V.77. P.075326 (11p.).
13. Peisakhovich Yu.G., Shtygashev A.A. Formation of quasi-stationary state by Gaussian wave packet scattering on the lattice of N identical delta-potentials // Phys. Rev. B. 2008. V.77, P. 075327 (9p.).
14. Штыгашев А.А. Применение неравномерной сетки в численном анализе спектральной задачи Штурма-Лиувилля. // «Актуальные проблемы электронного приборостроения» / Материалы IX международной конференции. Новосибирск, 2008. Т.6. С.117-121.
15. Штыгашев А.А. Распад квазистационарного состояния в решетке дельта-барьеров // Математическое моделирование. 2009. Т.21. №5. С. 67-76.
16. Штыгашев А.А. Осцилляции тока из двойной квантовой ямы при распаде квазистационарного состояния. // Известия вузов. Физика. 2009. Т.52. №9. С.46-50.
17. Штыгашев А.А. Коллапс резонансов в сверхрешетках. // Известия вузов. Физика. 2010. Т.53. №8. С.17-23.
18. Штыгашев А.А., Пейсахович Ю.Г. Рассеяние ультразвуковой волны ферромагнитной пластиной // «Актуальные проблемы электронного приборостроения» / Материалы X международной конференции. Новосибирск, 2010 Т.6. С.29-33.
19. Штыгашев А.А. Коллапс резонансов в симметричной двойной сверхрешетке $(CaF_2/Si)_n/CaF_2$ конечной длины // Международная конференция с элементами научной школы для молодежи «Нанозоника и наноэлектроника» «Мезоскопические структуры в фундаментальных и прикладных исследованиях». Новосибирск, 2010. С.26-30.
20. Штыгашев А.А. Гибридный алгоритм в методе трансфер-матрицы. // Актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП-2010 / Материалы X международной конференции. Новосибирск, 2010. Т.6. С.161-165.

21. Штыгашев А.А. Математическое моделирование стационарных состояний частицы в многослойной структуре во внешних силовых полях // X Всероссийская научная конференция «Краевые задачи и математическое моделирование». Новокузнецк, 2010. С.115-122.
22. Peisakhovich Y.G., Shtygashev A.A. Formation of quasistationary states in a ferromagnetic plate by scattering of ultrasound impulse in the vicinity of magnetoacoustic resonance // J. Appl. Phys. 2011. V.110. N.5. P.053904
23. Штыгашев А.А. Прохождение ультразвуковой волны через магнитную сверхрешетку конечной длины // ФТТ. 2011. Т.53. №5. С.964-970.
24. Штыгашев А.А., Овчинников Ю.Э. Моделирование процесса переноса заряда в системе «фотосенсибилизатор-наночастицы-коллектор» с помощью волнового пакета // Научный вестник НГТУ. 2011. №2(43). С.107-114.
25. Штыгашев А.А. Применение гибридного алгоритма в спектральной задаче Штурма-Лиувилля для многослойных структур во внешних силовых полях // Научный вестник НГТУ 2011. №1(42). С.77-88.
26. Штыгашев А.А. Рассеяние волнового пакета решеткой дельта-барьеров в электрическом поле // ДАН ВШ РФ 2011. №1(16). С.64-74.
27. Пейсахович Ю.Г., Штыгашев А.А. Осцилляции тока при фотоэмиссии через трехбарьерную структуру // ДАН ВШ РФ. 2011. №1(16). С.26-40.
28. Пейсахович Ю.Г., Штыгашев А.А. Взаимодействие ультразвукового импульса с ферромагнитной пластиной в условиях магнитоакустического резонанса // Журнал сибирского федерального университета. Математика и физика. 2011. №3. С.371-381.