**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**
**ВОЛИНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**
**ІМЕНІ ЛЕСІ УКРАЇНКИ**
**Кафедра теоретичної та комп'ютерної фізики**
**імені А.В. Свідзинського**

На правах рукопису

**Хаймик Каріна Володимирівна**

# РЕЗОНАНСНЕ ТУНЕЛЮВАННЯ ЗА НАЯВНОСТІ МАГНІТНОГО ПОЛЯ

Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»
Освітньо-професійна програма «Фізика та астрономія»
Робота на здобуття освітнього ступеня «Магістр»

Науковий керівник:
**ШИГОРІН ПАВЛО ПАВЛОВИЧ,**
кандидат фізико-математичних наук, доцент

РЕКОМЕНДОВАНО ДО ЗАХИСТУ
Протокол № _________
засідання кафедри теоретичної та
комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського
від ___________________________ 2024
Завідувач кафедри
доц. Сахнюк В.Є.________________

**ЛУЦЬК – 2024**

# ЗМІСТ

# ВСТУП

Квантова механіка, як одна з фундаментальних теорій сучасної фізики, дає змогу пояснити низку явищ, які не можуть бути описані засобами класичної механіки. Одним із таких явищ є квантове тунелювання – процес, коли частинка має можливість подолати потенційний бар'єр, навіть якщо її енергія менша за висоту цього бар'єру. Цей феномен має ключове значення в багатьох галузях науки і техніки, таких як фізика твердого тіла, ядерна фізика, хімія, а також у розробці новітніх технологій на базі квантових обчислень.

Одним із важливих факторів, що впливають на квантове тунелювання, є наявність магнітного поля. Магнітні поля здатні суттєво змінювати характеристики частинок, що взаємодіють із потенційним бар'єром, впливаючи на ймовірність тунелювання та час його протікання. Вивчення цих взаємодій є актуальним як із теоретичної точки зору, так і з практичної, оскільки результати таких досліджень можуть мати застосування в створенні нових матеріалів та пристроїв, що використовують квантові явища.

**Актуальність дослідження**. Тунелювання – це один із найцікавіших та найважливіших квантових ефектів, який не має класичного аналогу і відіграє ключову роль у багатьох фізичних явищах та технічних пристроях, таких як напівпровідники, тунельні діоди, нанотехнології та квантова електроніка. Вивчення тунелювання за наявності магнітного поля дозволяє краще зрозуміти складні квантові процеси, які виникають при взаємодії заряджених частинок з магнітними полями, що може бути корисним для розробки нових матеріалів і пристроїв.

**Метою** цієї магістерської роботи є детальне дослідження квантового тунелювання в присутності магнітного поля, визначення його впливу на ефективність та ймовірність проходження частинок через потенційні бар'єри, а також аналіз можливих прикладних аспектів цього явища.

**Завдання дослідження:**

– розглянути основні поняття і принципи квантового тунелювання;

– вивчити тунелювання електронів через подвійний дельта-функційний бар’єр у контексті класичних і квантових підходів;

– описати основні аспекти впливу магнітного поля на рух заряджених частинок і тунелювання;

– оцінити можливі практичні застосування результатів дослідження в фізиці конденсованих середовищ, нанотехнологіях, квантовій електроніці.

**Об’єктом дослідження** є процес квантового тунелювання заряджених частинок через потенціальні бар’єри в умовах наявності магнітного поля. Зокрема, дослідження зосереджено на впливі магнітного поля на ймовірність тунелювання, з урахуванням таких ефектів, як циклотронний рух частинок і квантове магнітне тунелювання, а також на взаємодії між магнітним полем і потенціальними бар’єрами, такими як дельта-функційні бар’єри, що можуть виникати в різних фізичних і технічних контекстах.

**Предметом дослідження** є механізм квантового тунелювання заряджених частинок через потенційні бар’єри за наявності магнітного поля.

**Наукова новизна** дослідження полягає в детальному аналізі впливу магнітного поля на процес квантового тунелювання, що дозволяє розширити розуміння взаємодії магнітних полів з квантовими частинками в умовах потенціальних бар’єрів.

Дослідження квантового тунелювання за наявності магнітного поля має значний **практичний потенціал** у кількох ключових напрямках:

– розуміння механізмів квантового тунелювання в магнітному полі є важливим для створення нових квантових комп’ютерів, квантових сенсорів та інших квантових пристроїв. Наприклад, розрахунки ймовірностей тунелювання можуть допомогти в оптимізації роботи квантових процесорів і визначенні стабільності квантових інформаційних потоків у магнітних системах;

– практичне застосування отриманих результатів є перспективним для розробки нових магнітних матеріалів та наноструктур. Наприклад, точне моделювання магнітного тунелювання через потенціальні бар’єри може покращити виробництво магнітних наноструктур з заданими властивостями, що використовуються в спінтроніці та інших передових технологіях;

– розуміння квантових ефектів у магнітних полях має важливе значення для удосконалення методів магнітно-резонансної томографії (МРТ) і магнітно-резонансної спектроскопії (МРС). Прогнозування та маніпулювання тунелюванням заряджених частинок може покращити точність та чутливість цих методів в медичних дослідженнях і діагностиці;

– практичне застосування результатів дослідження має значення для проектування нових пристроїв на основі магнітних тунельних наноструктур, таких як тунельні магнітні резонатори, що використовуються в сховищах даних, магнітних датчиках, а також в системах для зберігання та обробки інформації;

– розуміння тунелювання заряджених частинок за наявності магнітного поля може допомогти в розробці нових методів для більш ефективного використання енергії в магнітних пристроях, таких як магнітні холодильники або генератори на основі квантових ефектів.

Загалом, це дослідження надає нові можливості для практичного застосування квантових ефектів в реальних технологічних процесах, що може мати суттєвий вплив на розвиток передових науково-технічних галузей.

**Апробація результатів дослідження** підтверджена участі в конференції

**Структура роботи.** Кваліфікаційна (магістерська) робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел.

# РОЗДІЛ 1

# ТУНЕЛЮВАННЯ В КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

## 1.1. Суть явища тунелювання

Квантова механіка, будучи однією з найважливіших фундаментальних теорій фізики, розширила наші уявлення про мікросвіт і привела до революційних відкриттів, що змінили наше розуміння природи. Одним із таких важливих і загадкових явищ є квантове тунелювання, яке докорінно відрізняється від класичних уявлень про рух частинок.

Квантове тунелювання – це рідкісне явище, яке з точки зору класичної фізики здається неможливим, але лише зараз ми починаємо усвідомлювати, наскільки нечасто воно трапляється у реальності.

Це явище є прикладом того, як субатомні частинки можуть поводитися всупереч законам класичної фізики. У випадку квантового тунелювання, об'єкт, який опинився в енергетичній пастці, що вимагає певної кількості енергії для виходу, покидає її, маючи при цьому менший запас енергії. Це демонструє хвильово-частинкову дуальність частинок, таких як електрони. Класична частинка не може подолати бар'єр, але хвиля іноді здатна. Наприклад, альфа-розпад атомних ядер є процесом, що залежить від квантового тунелювання.

Квантове тунелювання полягає в тому, що частинка, яка не має достатньої енергії для подолання потенційного бар'єру, все ж може пройти крізь нього, завдяки квантовим ефектам. Це явище, хоча й контрінтуїтивне з точки зору класичної фізики, має підтвердження у численних експериментах та відіграє ключову роль у багатьох фізичних процесах. Наприклад, квантове тунелювання лежить в основі таких явищ, як термоядерні реакції в зорях, напівпровідникові прилади та атомний розпад.

Вивчення тунельного ефекту має величезне значення не тільки для глибшого розуміння природи квантових систем, але й для практичних застосувань у таких галузях, як електроніка, квантові обчислення та матеріалознавство. Тому дослідження цього явища є надзвичайно актуальним і важливим завданням сучасної науки.

Квантове тунелювання – це одне з найбільш дивовижних і незвичних явищ, яке демонструє квантова механіка. Воно стосується поведінки мікрочастинок, таких як електрони чи фотони, що можуть проходити крізь потенційний бар’єр, який класично мав би бути непрохідним через недостатню енергію частинки. Це явище не має аналогів у класичній фізиці, що робить його однією з ключових ознак квантової теорії [4, с. 96].

Основи квантового тунелювання ґрунтуються на фундаментальних принципах квантової механіки, що дозволяють частинкам долати потенційні бар’єри, які за класичною фізикою були б непрохідними. Це явище є одним із найбільш контрінтуїтивних результатів квантової теорії, що демонструє принцип хвильово-частинкової дуальності та ймовірнісну природу квантових систем.

Квантове тунелювання стає можливим завдяки тому, що частинки на квантовому рівні поводяться не тільки як точки з певною масою (класична частинка), але й як хвилі. Це означає, що вони мають хвильову функцію $\boldsymbol{\psi(x)}$, яка описує ймовірність їхнього знаходження в певному місці простору.

У класичній фізиці, якщо частинка не має достатньої енергії, щоб подолати потенційний бар’єр, вона просто відбивається від нього. Наприклад, якщо частинка має енергію $\mathbf{E}$, а бар’єр має висоту $\mathbf{g>E}$, частинка не може перейти через нього. Проте в квантовій механіці хвильова функція частинки може проникати всередину бар’єра, навіть якщо енергія частинки менша за висоту бар’єра.

Коли частинка наближається до бар’єра, хвильова функція частинки починає експоненціально затухати всередині бар’єра, що означає зменшення ймовірності її знаходження там. Проте хвильова функція не спадає до нуля миттєво. Якщо бар’єр не занадто широкий і не занадто високий, існує ненульова ймовірність, що частинка «протунелює» через бар’єр і з’явиться на іншій стороні, незважаючи на те, що її енергія менша за потенціал бар’єра.

Ймовірність того, що частинка пройде через потенційний бар’єр, зменшується експоненціально із збільшенням товщини або висоти бар’єра. Це означає, що чим вищий бар’єр або чим більша його ширина, тим менше шансів, що частинка пройде через нього. Математично, ця ймовірність визначається як:

$$T \propto e^{-2kd} \qquad \textbf{(1.1)}$$

де: $k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ – параметр, що залежить від різниці між енергією частинки та висотою бар’єра, $\boldsymbol{d}$ – товщина бар’єра.

Квантове тунелювання демонструє основну відмінність між класичною та квантовою фізикою – на мікроскопічному рівні частинки не підкоряються жорстким законам класичної фізики. Їхня поведінка описується ймовірнісними хвильовими функціями, які дозволяють їм робити речі, що здаються неможливими, наприклад, проникати через бар’єри.

Отже, квантове тунелювання – це ключовий феномен, що відображає квантову природу частинок. Завдяки хвильовій природі, частинки можуть проходити через енергетичні бар’єри, які для класичних об’єктів непрохідні. Це явище лежить в основі багатьох процесів у природі та технологіях, демонструючи фундаментальні особливості квантової механіки.

Фізичні механізми тунелювання ґрунтуються на принципах квантової механіки, що описують поведінку частинок на субатомному рівні. Основною особливістю квантового тунелювання є здатність частинок долати потенційні бар’єри, навіть якщо їхня енергія є меншою за енергію бар’єра. Це явище пояснюється хвильовою природою частинок, як і рядом інших фізичних механізмів, що впливають на ймовірність тунелювання.

Згідно з квантовою механікою, частинки мають двоїсту хвильово-частинкову природу. Вони описуються хвильовою функцією **ψ(x)**, яка характеризує ймовірність знайти частинку в певній точці простору. Хоча за класичною фізикою частинка не може подолати потенційний бар’єр, її хвильова функція може проникати всередину бар’єра. Це призводить до того, що частинка має ймовірність «тунелювати» через бар’єр.

Коли частинка зустрічає потенційний бар'єр, в якому її енергія ***E*** менша за висоту бар'єра ***g***, хвильова функція експоненціально зменшується всередині цього бар'єра. У просторі, де ***E<g***, хвильова функція частинки спадає за законом:

$$\Psi(x) = \psi(0)e^{-\kappa x} \tag{1.2}$$

де $k = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$, $m$ – маса частинки, $x$ – координата, а $\hbar$ – зведена стала Планка.

Цей спад означає, що ймовірність знайти частинку всередині бар'єра швидко зменшується, але залишається ненульовою. Це дозволяє частинці з деякою ймовірністю подолати бар'єр і з'явитися на іншому його боці [9, с. 206].

Принцип невизначеності Гайзенберга є ключовим для розуміння квантового тунелювання у 1927 році. Він говорить про те, що неможливо точно визначити одночасно координату та імпульс частинки. Це означає, що коли частинка знаходиться поруч з потенційним бар'єром, не можна точно знати, чи має вона достатньо енергії для його подолання, оскільки її енергетичний стан має певну невизначеність. Таким чином, частинка має ймовірність з'явитися на іншій стороні бар'єра, навіть якщо її середня енергія менша за висоту бар'єра [13, с. 12].

## 1.2. Теоретичний опис квантового тунелювання

Розглянемо математичну модель, яка приводить до явища квантового тунелювання.

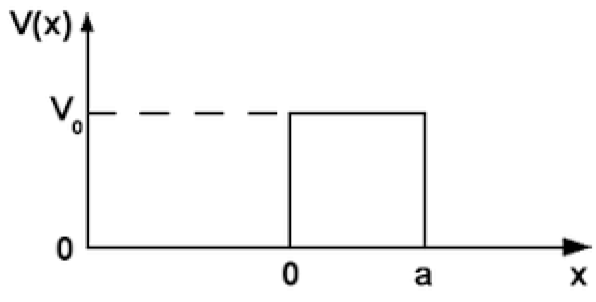


*Рис 1.1. Прямокутний потенціальний бар'єр.*

Для аналізу явища тунелювання використовують поняття «струм ймовірності», який для заданої хвильової функції(в одновимірному випадку) визначається наступним чином

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} - \psi(x)\frac{d\psi^*(x)}{dx}\right] \quad (1.3)$$

Будемо вважати, що зліва на бар'єр налітає частинка зі струмом ймовірності $j_0$. Нехай $j_1$ – частина потоку, яка відбилася від бар'єру, а $j_2$ – частина потоку, яка пройшла далі. Відповідно до закону збереження потоку справедливою є рівність

$$j_0 = j_1 + j_2;$$

Експериментально вимірювальними є величини $T = j_2 / j_0$ та $R = j_1 / j_0$, які називаються коефіцієнтами проходження(або прозорості) та відбивання відповідно. Очевидним фактом є те, що їхня сума тотожна одиниці.

Щоб знайти дані величини нам необхідно знайти відповідні хвильові функції. Для виконання такого завдання нам потрібно записати рівняння Шредінгера для трьох ділянок простору та знайти його розв'язки, накладаючи певні умови на хвильові функції.

Для нашої ознайомчої задачі потенціал (див. Рис. 1.1) можна записати так

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ V_0 = const, & 0 \le x \le a; \\ 0, & x > a; \end{cases}$$

Для ділянки $x < 0$ виберемо хвильову функцію $\psi_1 = \psi_1(x)$, для якої можна записати рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1$$

Ввівши нове позначення $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ прийдемо до простого диференціального рівняння

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_0^2\psi_1 = 0. \quad (1.4)$$

Розв'язком рівняння, очевидно, є

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_0x} + A_2 e^{-ik_0x} \quad (1.5)$$

На другій ділянці $0 \le x \le a$ для функції $\psi_2 = \psi_2(x)$ отримаємо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + V_0\psi_2 = E\psi_2$$

Ввівши нове позначення $k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$ прийдемо до простого диференціального рівняння

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k^2\psi_2 = 0;$$

Для цього рівняння маємо розв’язок

$$\psi_2(x) = B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \tag{1.6}$$

На третій ділянці маємо аналогічне до першого рівняння Шредінгера. Тому одразу можна записати розв’язок

$$\psi_3(x) = C_1 e^{ik_0 x} + C_2 e^{-ik_0 x} \tag{1.7}$$

Оскільки, в третій ділянці простору немає відбитої хвилі, то $C_2 = 0$; Тепер згідно з нашими означеннями можемо знайти струми ймовірності у відповідних ділянках простору:

$$j_0 = |A_1|^2 \frac{\hbar k_0}{m},$$

$$j_1 = |A_2|^2 \frac{\hbar k_0}{m},$$

$$j_2 = |C_1|^2 \frac{\hbar k_0}{m};$$

Отже, шукані коефіцієнти

$$\mathrm{T} \equiv \left|\frac{C_1}{A_1}\right|^2, R \equiv \left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2;$$

Врахуємо умови неперервності

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \psi_2'(a) = \psi_3'(a) \end{cases};$$

Тоді отримаємо лінійні рівняння відносно невідомих сталих

$$A_1 + A_2 = B_1 + B_2;$$

$$k_0(A_1 - A_2) = k(B_1 - B_2);$$

$$B_1 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = C_1 e^{ik_0 a};$$

$$k\left(B_1 e^{ika} - B_2 e^{-ika}\right) = k_0 C_1 e^{ik_0 a};$$

Виконавши всі необхідні операції для розв'язку цієї системи лінійних рівнянь, отримаємо

$$\mathrm{T} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 ka} \tag{1.7}$$

Знайти $R$ можна за очевидним співвідношенням $R = 1 - D$.

Аналізуючи вигляд знаменника виразу для коефіцієнта прозорості, бачимо, що при $ka = \pi n; n = 1,2, \ldots$, коефіцієнт прозорості дорівнює одиниці. Такі стани іменуються *резонансними:*

$$k^2 = n^2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2;$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - U) = n^2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2;$$

Отже,

$$E_n = U + \frac{\hbar^2}{2m} n^2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2.$$

### 1.3. Застосування явища квантового тунелювання у технологіях

Фізичні механізми тунелювання пояснюються квантовими властивостями частинок, які проявляють себе через їхню хвильову природу. Завдяки цьому явищу частинки можуть проходити через потенційні бар'єри, що робить тунелювання ключовим елементом у багатьох природних і технологічних процесах.

Квантове тунелювання є ключовим явищем у багатьох фізичних процесах і має важливі приклади в різних областях науки та техніки. Ось кілька найвідоміших прикладів квантового тунелювання:

1. Альфа-розпад – це процес, при якому важке атомне ядро випромінює альфа-частинку (ядро гелію, що складається з двох протонів і двох нейтронів). У цьому процесі альфа-частинка повинна подолати сильний ядерний потенціальний бар'єр, утворений взаємодією протонів всередині ядра. За класичною фізикою частинка не могла б залишити ядро через висоту цього бар'єра, однак завдяки квантовому тунелюванню вона з певною ймовірністю

«протунелює» через нього. Це і є механізмом альфа-розпаду, який відповідає за радіоактивний розпад деяких елементів, таких як уран або радій.

2. Тунельні діоди – це напівпровідникові прилади, які використовують явище квантового тунелювання для створення струму через бар’єр. У звичайних діодах електрони повинні мати достатню енергію, щоб подолати потенційний бар’єр між областями *p*- і *n*-типу напівпровідників. Проте у тунельних діодах електрони тунелюють через бар’єр, навіть якщо вони мають енергію, нижчу за цей бар’єр. Це призводить до унікальних електричних характеристик, таких як негативний диференціальний опір, який використовується в швидкодіючих електронних схемах.

3. У сучасній електроніці, зокрема в мікросхемах, транзисторах і інших напівпровідникових пристроях, тунелювання відіграє важливу роль, особливо в дуже малих масштабах. У транзисторах на основі ефекту польової емісії, коли розміри приладу зменшуються до нанометрового діапазону, тунелювання електронів стає значущим явищем. Це може впливати на роботу приладів і призводити до «витоків» струму через ізолюючі шари, що є проблемою для подальшого зменшення розмірів напівпровідникових елементів.

4. У зірках, таких як Сонце, відбуваються термоядерні реакції, які підтримують їхнє сяяння. Для того, щоб ці реакції відбулися, ядра водню (протони) повинні зливатися, долаючи електростатичний кулонівський бар’єр, що викликаний їхнім позитивним зарядом. За звичайних умов, енергії частинок у центрі зірки недостатньо для подолання цього бар’єра, проте завдяки квантовому тунелюванню ядра протонів можуть зближуватися й зливатися, утворюючи гелій. Це є основним механізмом, який живить зірки і забезпечує термоядерний синтез.

5. Скануючий тунельний мікроскоп (STM) використовує принцип тунелювання для створення надзвичайно точних зображень поверхонь на атомарному рівні. В STM тонкий металевий зонд наближається до поверхні зразка на відстань у кілька ангстремів (атомні розміри). Коли зонд знаходиться достатньо близько до поверхні, між ним і зразком виникає тунельний струм –

електрони «протунелюють» через невеликий зазор, хоча класично це неможливо через відсутність достатньої енергії. Вимірюючи цей струм, можна отримати зображення поверхні на атомарному рівні. STM дозволяє вивчати структури поверхонь з надзвичайно високою роздільною здатністю.

6. Квантове тунелювання також відіграє роль у деяких хімічних реакціях та біологічних процесах. Наприклад, при утворенні або руйнуванні хімічних зв'язків електрони можуть тунелювати між атомами, що впливає на швидкість та можливість реакції. У деяких біологічних процесах, таких як міграція електронів у ланцюгах переносу електронів в клітинах (наприклад, у дихальному ланцюзі), тунелювання може забезпечувати ефективний перенос електронів на дуже короткі відстані.

7. У металах і напівпровідниках електрони можуть тунелювати між енергетичними зонами, коли певні умови дозволяють це. Такий процес часто відбувається в надпровідниках або при низьких температурах, коли тунелювання електронів між двома зонами може забезпечити виникнення струму без опору.

8. Тунелювання не обмежується тільки електронами. Протони також можуть проходити крізь потенційні бар'єри завдяки квантовому тунелюванню. Це явище спостерігається в деяких реакціях в ядерній фізиці, а також у певних молекулярних процесах, де протони тунелюють між атомами.

Отже, квантове тунелювання є фундаментальним процесом, який має багато застосувань у різних галузях науки, від атомної фізики до напівпровідникових технологій і хімії. Воно пояснює деякі з найбільш незвичних і важливих явищ у природі та технологіях, підтверджуючи незвичайну і ймовірнісну природу квантового світу.

Квантові технології є напрямком, який використовує явища квантової механіки для розробки нових приладів та систем, здатних забезпечити революційні зміни у багатьох галузях – від обчислювальної техніки до безпеки інформації та медицини. Одним із ключових аспектів квантових технологій є **квантове тунелювання** – процес, у якому частинки можуть проходити через потенційний бар'єр, хоча класично це неможливо.

Ключовими особливостями квантових технологій є:

– **квантова суперпозиція**, **де ч**астинка перебуває в кількох станах одночасно. Ця властивість використовується в квантових комп'ютерах, де кубіти (квантові біти) можуть зберігати і обробляти інформацію не тільки як 0 або 1, але й у суперпозиції цих станів;

**– квантова заплутаність, де ч**астинки є взаємопов'язані таким чином, що зміна стану однієї з них миттєво змінює стан іншої, незалежно від відстані між ними. Це явище застосовується в квантовій криптографії для захищеного зв'язку;

**–квантове тунелювання, де о**дним із фундаментальних механізмів у квантових технологіях є тунелювання. Завдяки хвильовій природі частинок, електрони, протони або інші квантові об'єкти можуть проходити через потенційні бар'єри, що має величезне значення для різних технологічних застосувань, як описано нижче.

Завдяки розвитку квантових технологій, квантове тунелювання знайшло нові застосування. Однією з таких сфер є **квантові комп'ютери,** які використовують явище суперпозиції та тунелювання для виконання обчислень із небаченою швидкістю.

Квантове тунелювання також є основою для **квантової криптографії,** що забезпечує безпеку передачі інформації на основі фундаментальних законів квантової механіки.

Квантове тунелювання є важливою складовою сучасних квантових технологій, оскільки воно відкриває нові можливості для розробки пристроїв, що працюють на основі законів квантової механіки. Тунелювання дозволяє подолати обмеження класичної фізики, забезпечуючи нові технологічні рішення в електроніці, сенсориці, обчислювальній техніці та інших галузях

Попри значні досягнення у вивченні тунелювання, існують складнощі в точному математичному описі деяких складних систем та бар'єрів, де квантове тунелювання відбувається за участі багатьох частинок або в сильно змінених умовах, таких як магнітні поля або взаємодія з іншими потенціалами.

Перспективи досліджень пов’язані з можливістю покращення нашого розуміння тунелювання в складних квантових системах, що може відкрити нові горизонти у квантових технологіях, нанотехнологіях та інших областях науки.

# РОЗДІЛ 2

# ТУНЕЛЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНІВ КРІЗЬ ПОДВІЙНИЙ ДЕЛЬТА-ФУНКЦІЙНИЙ БАР’ЄР

## 2.1. Матемаматична модель

Тунелювання електронів через **подвійний дельта-функційний бар’єр** – це цікава задача квантової механіки, яка демонструє, як частинка (електрон) може проходити через два потенційні бар’єри за допомогою квантового тунелювання, ідеалізована модель, яка описує систему з двома потенційними бар’єрами, що розташовані на певній відстані один від одного і представлені дельта-функціями. Цей випадок є аналітично вирішуваною моделлю, що дозволяє зрозуміти основні аспекти квантового тунелювання та його залежність від параметрів системи. Така система застосовується в квантовій механіці для вивчення поведінки частинки в потенціальному бар’єрі, зокрема для аналізу явища тунелювання, резонансного тунелювання та інтерференційних ефектів.

Потенціал системи подвійного дельта-функційного бар’єра описується як комбінація двох дельта-функцій, які розташовані симетрично відносно початку координат на відстані ***2d*** одна від одної (Рис. 2.1.). Така система потенціалу є ідеалізованою моделлю, що дозволяє аналітично досліджувати явище квантового тунелювання.

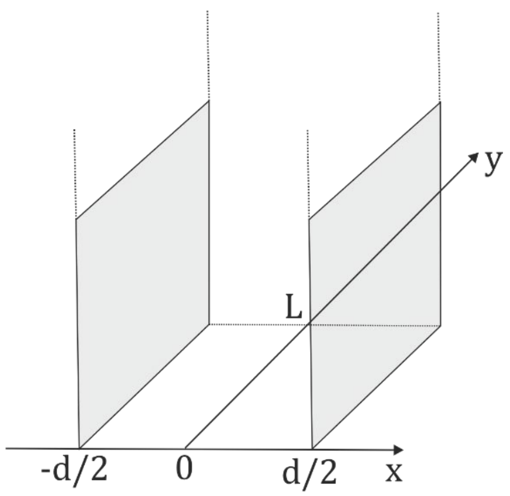


Рис. 2.1 Модель подвійного дельта-функційного бар’єра.

Система подвійного дельта-функційного бар'єра є корисною для моделювання резонансного тунелювання, оскільки між двома бар'єрами можуть виникати квазізв'язані стани, що дозволяють частинці «застрягати» між бар'єрами на деякий час. Це призводить до появи резонансних піків у коефіцієнті проходження частинки через потенціал при певних значеннях енергії.

У цьому випадку потенціал набуде вигляду

$$U(x) = -\alpha[\delta(x+a) + \delta(x-a)],$$

де $\alpha$ – якась додатна дійсна величина, яка характеризує висоту бар'єра.

Розв'язок рівняння Шредінгера для трьох ділянок простору можна подати у вигляді

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \ (x < -a) \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} \ (-a < x < a) \\ Fe^{ikx} \ (x > a) \end{cases} \tag{2.1}$$

Умова неперервності в точці $-a$ дає нам співвідношення

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-ika} + De^{ika}$$

Якщо ввести новий параметр $\beta \equiv e^{-2ika}$, тоді будемо мати

$$\beta A + B = \beta C + D \tag{2.2}$$

А умова неперервності в точці $+a$ дає нам наступне співвідношення

$$Ce^{ika} + De^{-ika} = Fe^{ika};$$

$$F = C + \beta D. \tag{2.3}$$

Разом з тим, маємо стрибок першої похідної від хвильової функції в точках $-a$ та $+a$:

$$ik\left(Ce^{-ika} - De^{ika}\right) - ik\left(Ae^{-ika} - Be^{ika}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\left(Ae^{-ika} + Be^{ika}\right);$$

$$ikFe^{ika} - ik\left(Ce^{ika} - De^{-ika}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}Fe^{ika};$$

Якщо ввести новий параметр $\gamma \equiv i2m\alpha/\hbar^2 k$, то умови стрибка хвильової функції набудуть нового вигляду

$$\beta C - D = \beta(\gamma + 1)A + B(\gamma - 1), \tag{2.4}$$

$$C - \beta D = (1 - \gamma)F. \tag{2.5}$$

Додаймо (2.3) до (2.5) та отримаємо

$$2C = F + (1-\gamma)F = (2-\gamma)F.$$

Якщо віднімемо (2.3) від (2.5), то будемо мати

$$2\beta D = F - (1-\gamma)F \Rightarrow 2D = \frac{\gamma}{\beta}F. \qquad (2.6)$$

Аналогічні дії можемо виконати і з рівняннями (2.2) та (2.4). Відповідно отримаємо

$$2\beta C = \beta A + B + \beta(\gamma+1)A + B(\gamma-1) \Rightarrow 2C = (\gamma+2)A + \frac{\gamma}{\beta}B,$$

$$2D = \beta A + B - \beta(\gamma+1)A - B(\gamma-1) \Rightarrow 2D = -\gamma\beta A + (2-\gamma)B;$$

Прирівняємо вирази для $2D$ та $2C$

$$(2-\gamma)F = (\gamma+2)A + \frac{\gamma}{\beta}B,$$

$$\frac{\gamma}{\beta}F = -\gamma\beta A + (2-\gamma)B;$$

Якщо перше з отриманих рівнянь домножити на $\beta(2-\gamma)$, а друге на $\gamma$, то матимемо

$$\beta(2-\gamma)^2 F = \beta(4-\gamma^2)A + \gamma(2-\gamma)B,$$

$$\frac{\gamma^2}{\beta}F = -\gamma^2\beta A + \gamma(2-\gamma)B;$$

Віднявши їх, отримаємо

$$\left[\beta(2-\gamma)^2 - \frac{\gamma^2}{\beta}\right]F = \beta[4-\gamma^2+\gamma^2]A = 4\beta A \Rightarrow \frac{F}{A} = \frac{4}{(2-\gamma)^2 - \frac{\gamma^2}{\beta^2}}.$$

Введемо нові параметри $g \equiv \frac{i}{\gamma} = \frac{\hbar^2 k}{2m\alpha}, \phi \equiv 4ka$.

Отже, $\gamma = \frac{i}{g}, \beta^2 = e^{-i\phi}$. Відповідно,

$$\frac{F}{A} = \frac{4g^2}{(2g-i)^2 + e^{-i\phi}}.$$

З огляду на ці результати, можемо знайти коефіцієнт проходження

$$T = \left|\frac{F}{A}\right| = \frac{8g^4}{(8g^4+4g^2+1) + (4g^2-1)\cos\phi - 4g\sin\phi}. \qquad (2.7)$$

## 2.2. Резонансне тунелювання в системі з подвійним дельта-функційним бар’єром

Одержане у попередньому розділі співвідношення для коефіцієнта тунелювання (2.7) демонструє цікаву особливість тунелювання, а саме наявність станів, за яких бар’єр стає повністю прозорим (Рис. 2.2).

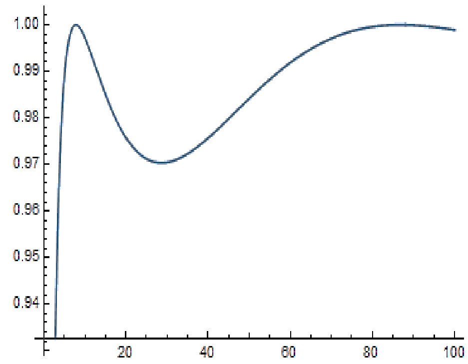


Рис. 2.2. Резонансне тунелювання.

На основі формули (2.7) знаходимо умову резонансу

$$\beta \sin ka - 2 \cos ka\, k = 0.$$

Інтерференційний ефект у системі подвійного дельта-функційного бар’єра є результатом взаємодії хвиль, які відбиваються та проходять через два вузьких потенціальних бар’єри, розташованих на певній відстані один від одного. Коли квантова частинка (наприклад, електрон) рухається через цей подвійний бар’єр, її хвильова функція зазнає багаторазового відбиття між двома бар’єрами, що призводить до виникнення інтерференційної картинки. Це проявляється у змінній ймовірності проходження частинки через систему залежно від її енергії.

Інтерференція хвиль у системі подвійного дельта-функційного бар’єра полягає в тому, що така структура демонструє яскраві квантові ефекти, зокрема явище інтерференції та резонансного тунелювання. Коли частинка проходить через два дельта-функційні бар’єри, її хвильова функція взаємодіє з обома бар’єрами, і хвилі, відбиті від кожного з бар’єрів, можуть інтерферувати між собою.

Якщо енергія частинки відповідає умовам резонансу, хвилі всередині центральної області між бар’єрами інтерферують конструктивно, що призводить до збільшення ймовірності проходження частинки крізь бар'єри. У цьому випадку коефіцієнт пропускання ***T*** досягає максимуму. Якщо ж енергія частинки не відповідає резонансним умовам, виникає деструктивна інтерференція, яка зменшує коефіцієнт пропускання і підвищує ймовірність відбиття.

Це явище інтерференції хвиль у системі з подвійним бар'єром є важливим для розуміння квантового тунелювання в складних потенціалах та знаходить застосування в нанофізиці й електроніці, зокрема у тунельних діодах і квантових резонаторах

Резонансне тунелювання має важливе значення як для теоретичної фізики, так і для практичних застосувань, оскільки воно демонструє основи квантової інтерференції і є основою для багатьох сучасних квантових технологій, таких як резонансні тунельні діоди, квантові точки і наноструктури, що використовуються в мікроелектроніці та оптоелектроніці.

Резонансне тунелювання в системі подвійного дельта-функційного бар'єра є квантовим ефектом, при якому частинка з певною енергією може з високою ймовірністю пройти крізь обидва бар'єри завдяки конструктивній інтерференції хвильової функції в центральній області між бар'єрами. Це явище є наслідком хвильової природи частинки, що дозволяє їй проникати через потенціальні бар'єри, навіть якщо її енергія менша за висоту бар'єрів.

Резонансне тунелювання відбувається тоді, коли енергія частинки відповідає таким умовам, при яких хвилі, що відбиваються і проходять між бар'єрами, інтерферують конструктивно. Це призводить до збільшення амплітуди хвильової функції в центральній області між бар'єрами, а отже, до зростання ймовірності того, що частинка пройде через обидва бар'єри. Такі значення енергії називаються резонансними енергіями.

# РОЗДІЛ 3

# ТУНЕЛЮВАННЯ ЗА НАЯВНОСТІ МАГНІТНОГО ПОЛЯ

## 3.1. Рух частинок в магнітному полі

Розглянемо випадок тунелювання у зовнішньому магнітному полі. Тунелювання у магнітному полі – це явище, яке відбувається, коли частинка долає потенціальний бар'єр за наявності зовнішнього магнітного поля. Цей процес описується квантовою механікою, оскільки частинка, яка за класичними уявленнями не мала б подолати бар'єр через недостатню енергію, завдяки хвильовій природі має ймовірність пройти крізь нього.

При цьому магнітне поле впливає на тунелювання, оскільки змінює фазу хвильової функції частинки, яка рухається в потенціальному бар'єрі.

Вплив магнітного поля на фазу хвильової функції частинки описується ефектом Ааронова-Бома. Це явище показує, що магнітне поле може змінювати фазу хвильової функції частинки, навіть якщо сама частинка не проходить безпосередньо через область з ненульовим магнітним полем.

Ефект Ааронова-Бома (англ. Aharonov-Bohm effect) – це квантовомеханічний феномен, що демонструє вплив електромагнітного поля, яке знаходиться в області, недосяжній для зарядженої частинки, на її квантовий стан. Цей ефект, що не має аналогів у класичній фізиці, показує, що в квантовому описі взаємодія зарядженої частинки з електромагнітним полем не зводиться лише до локальної дії через силу Лоренца. Вперше на можливість такого ефекту вказали В. Еренберг та Р. Сайді у 1949 році. Пізніше, у 1959 році, Я. Ааронов і Д. Бом детально дослідили ефект і виявили його важливий зв'язок з принципами квантової теорії, наголосивши на особливій ролі електромагнітних потенціалів у квантовій механіці [1, с. 52].

Ефект Ааронова-Бома можливий завдяки тому, що рівняння Шредінгера для хвильової функції зарядженої частинки у зовнішньому електромагнітному полі включає потенціал цього поля. Потенціал впливає на фазу хвильової функції і, при відповідній геометрії експерименту, спричиняє інтерференційний ефект навіть без прямої силової дії поля на частинку. Ефект є калібрувально незалежним і обумовлений фазовою різницею між різними шляхами, які може пройти частинка. Це явище проявляється як для скалярного, так і для векторного потенціалу електромагнітного поля.

Розглянемо наступну систему, яка схематично зображена на Рис. 3.1.

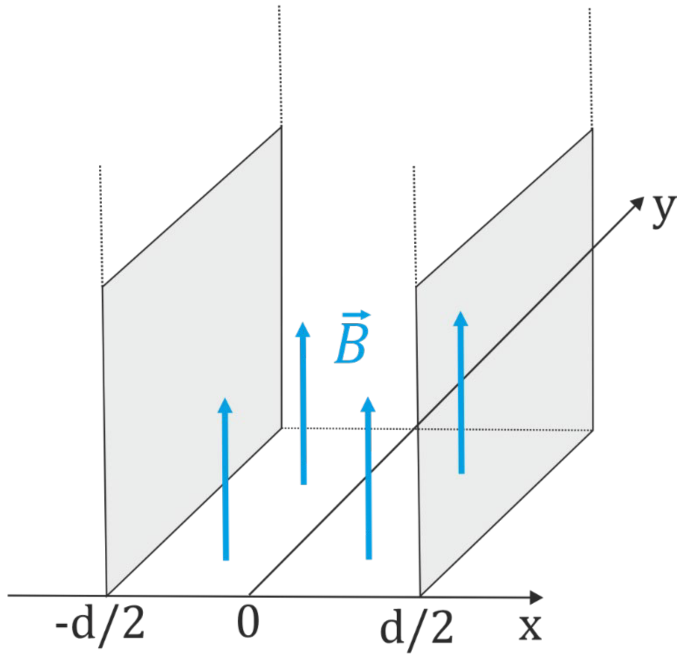


Рис. 3.1. Подвійний бар’єр у магнітному полі.

Оператор Гамільтона для зарядженої частинки в електромагнітному полі описує її енергію з урахуванням взаємодії з полем. Він базується на принципах квантової механіки та класичної електродинаміки.

Оператор Гамільтона зарядженої частинки в електромагнітному полі має вигляд [5, с. 75]:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m}(\widehat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A})^2 + e\varphi \tag{3.1}$$

де φ – скалярний потенціал, **A –** вектор-потенціал, $\widehat{\mathbf{p}}$ – узагальнений оператор імпульсу.

Але насправді такого запису оператора енергії все ще недостатньо. Проблема полягає в тому, що власний магнітний момент частинки взаємодіє з магнітним полем. Аби врахувати ці обставини потрібно доповнити гамільтоніан доданком $-\boldsymbol{\mu H}$, який відповідає енергії магнітного моменту $\boldsymbol{\mu}$ в полі $\boldsymbol{H}$. Отже, оператор Гамільтона набуде нового вигляду:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \boldsymbol{\mu H} + e\varphi$$

Розкривши дужки, отримаємо

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2 - \frac{\mu}{s}\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{H}$$

Відповідно до відомих правил комутації, маємо

$$\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\, div\, \boldsymbol{A}$$

Очевидно, що оператор імпульсу та вектор-потенціал комутують лише тоді, коли виконується умова $div\, \boldsymbol{A} = 0$. Це, зокрема, справедливо якщо вибрати вектор-потенціал у наступному вигляді

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}[\boldsymbol{Hr}]$$

Оскільки потенціали визначаються не цілком однозначно, тобто з точністю до *калібрувального перетворення*

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} + \boldsymbol{\nabla}\mathrm{f},$$

$$\varphi \to \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}$$

де $f$ – довільна функція координат і часу, то й хвильовій функції в електромагнітному полі теж буде властива певна неоднозначність. Але ця неоднозначність не вплине на модуль хвильової функції, в чому можна легко переконатися

$$\psi \to \psi e^{\frac{ie}{\hbar c}f}$$

тоді,

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = \psi e^{\frac{ie}{\hbar c}f}\psi^* e^{\frac{-ie}{\hbar c}f} = \psi\psi^* = |\psi|^2$$

Для того, аби визначити рівні енергії частики в однорідному магнітному полі, можна застосувати наступні міркування.

Зручно обрати такий вигляд векторного потенціалу:

$$A_x = -Hy, A_y = A_z = 0 \tag{3.2}$$

Це вказує на те, що магнітне поле направлене вздовж осі z.

Тоді матимемо гамільтоніан (3.1) у наступному вигляді

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{p_x} + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \frac{\widehat{p_y^2}}{2m} + \frac{\widehat{p_z^2}}{2m} - \frac{\mu}{s}\widehat{s_z}H. \quad (3.3)$$

Відомо, що, якщо якийсь оператор комутує з оператором енергії, то відповідна йому фізична величина зберігається. Дивлячись на форму оператора Гамільтона, можна помітити, що він містить лише $z$-компоненту оператора спіну та жодних інших. Безпосереднім обчисленням можна переконатися, що він комутує з гамільтоніаном. Отже, оператор спіну зберігається $\widehat{s_z}$, тому можемо замінити його власним значенням σ.

Тому маємо таке рівняння для хвильової функції

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\widehat{p_x} + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \frac{\widehat{p_y^2}}{2m} + \frac{\widehat{p_z^2}}{2m}\right]\psi - \frac{\mu}{s}\sigma H\psi = E\psi. \quad (3.4)$$

Робимо висновок, що з оператором Гамільтона також комутують оператори $\widehat{p_x}$ і $\widehat{p_z}$, бо відповідні їм координати не входять явно в гамільтоніан. Тобто x- і z-компоненти узагальненого імпульсу зберігаються. Тому можемо надати шуканій хвильовій функції наступного вигляду

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + zp_z)}\chi(y). \quad (3.5)$$

Підставивши такий вираз у рівняння Шредінгера, отримаємо рівняння для $\chi(y)$ в наступному вигляді

$$\frac{d^2\chi(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left\{\left(E + \frac{\mu\sigma}{s}H - \frac{p_z^2}{2m}\right) - \frac{m}{2}\omega_H^2(y - y_0)^2\right\}\chi(y) = 0, \quad (3.6)$$

де введені наступні позначення

$$y_0 = -\frac{cp_x}{eH}$$

$$\omega_H = \frac{|e|H}{mc}.$$

Отримане рівняння за своєю структурою аналогічне до рівняння, яке описує поведінку гармонічного осцилятора, котрий коливається з частотою $\omega_H$.

Дискретні рівні енергії визначаються наступним співвідношенням

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_H + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s}H. \quad (3.7)$$

Вони називаються *рівнями Ландау.* Для електрона($^{\mu}/_{S} = -|e|\hbar/mc$) рівні Ландау матимуть вигляд

$$E = \left(n + \frac{1}{2} + \sigma\right)\hbar\omega_H + \frac{p_z^2}{2m}. \tag{3.8}$$

Відповідні рівням Ландау власні функції $\chi(y)$ визначаються формулою

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} a_H^{\frac{1}{2}} \sqrt{2^n n!}} exp\left[-\frac{(y-y_0)^2}{2a_H^2}\right] H_n\left(\frac{y-y_0}{a_H}\right), \tag{3.9}$$

в якій $a_H = \sqrt{\hbar/m\omega_H}$ та $H_n$ – поліноми Ерміта.

### 3.2. Тунелювання в магнітному полі

Розглянемо тунелювання у моделі, що зображена на Рис. 3.1. Вона складається із 2 δ-функційних бар’єрів, розташованих у точках $x = 0$ та $x = a$. Між цими бар’єрами існує однорідне магнітне поле $H$, яке напрямлене вздовж осі z. Завдання полягає у відшуканні коефіцієнта прозорості для такої системи. Будемо вважати, що налітаючий потік частинок з енергією E рухається вздовж осі Ox. У точці $x = 0$ певна частина потоку відіб’ється так само як і в точці $x = a$. На ділянці $0 < x < a$ на частинки буде діяти однорідне магнітне поле.

Для $x < 0$ матимемо рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1.$$

Якщо ввести параметр $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, тоді дане рівняння матиме очевидний розв’язок

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}.$$

Такий вигляд хвильової функції для першої ділянки простору був обраний для зручності. Це дозволить в майбутньому уникнути зайвого ділення на комплексне число для пошуку коефіцієнта відбиття.

Для $x > a$ отримаємо аналогічне рівняння, але з додатковою умовою, яка полягає у відсутності в цій ділянці простору відбитої хвилі, тому розв’язок набуде вигляду

$$\psi_3(x) = De^{ikx}.$$

Як вже було сказано, розв'язок рівняння Шредінгера для частинки в магнтіному полі має вигляд (формула (3.5))

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x+zp_z)}\chi(y).$$

Визначення $\chi(y)$ детально подано в попередньому параграфі.

Оскільки ми вважаємо, що рух відбувається в площині xOy, то z-координату слід покласти рівною нулю. Разом з тим, на ділянці $0 < x < a$ наявні дві хвилі – відбита й та, що пройшла. Тому, аби відобразити цей факт, опираючись на лінійність рівняння Шредінгера, можемо обрати такий розв'язок на ділянці з магнітним полем

$$\psi_2 = \left[Be^{\frac{i}{\hbar}xp_x} + Ce^{-\frac{i}{\hbar}xp_x}\right]\chi(y).$$

В точках розміщення потенціальних бар'єрів потенціал матиме вигляд:

$$U(x) = \begin{cases} -\alpha\delta(x) \\ -\alpha\delta(x-a) \end{cases};$$

Зважаючи на це, отримаємо умови стрибка першої похідної від хвильової функції

$$\frac{d\psi_2}{dx}|_{x=0} - \frac{d\psi_1}{dx}|_{x=0} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_1(0),$$
$$\frac{d\psi_3}{dx}|_{x=a} - \frac{d\psi_2}{dx}|_{x=a} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_2(a).$$

Не зважаючи на те, що хвильова функція в другій ділянці є, насправді, функцією двох змінних (x, y), але, оскільки ми аналізуємо поширення потоку частинок вздовж осі Ox, то будемо притримуватися наступного позначення впродовж всього розділу

$$\psi_2(x) = \left[Be^{\frac{i}{\hbar}xp_x} + Ce^{-\frac{i}{\hbar}xp_x}\right]\chi(0).$$

Додаткового розуміння потребує величина імпульсу $p_x$ у виразі для $\psi_2$. Навіть із курсу класичної механіки відомо, що імпульс частинки $\vec{p}$ за наявності магнітного поля заміняється на вираз $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$. Саме цим фактом автори роботи, згаданої в розділі 1, скористалися для побудови гамільтоніана в магнітному полі. Оскільки в розв'язку задачі на власні значення оператора енергії фігурує $p_x$, то розуміємо, що $\psi_2$ визначається початковим імпульсом частинки. Зробимо відповідне перепозначення $p_x := p$.

Враховуючи всі вищенаведені факти, отримаємо систему лінійних алгебричних рівнянь

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \frac{d\psi_2}{dx}|_{x=0} - \frac{d\psi_1}{dx}|_{x=0} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_1(0) \\ \frac{d\psi_3}{dx}|_{x=a} - \frac{d\psi_2}{dx}|_{x=a} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_1(a) \end{cases} \tag{3.10}$$

Користуючись раніше встановленими виразами для хвильових функцій, обчислимо їхні значення у точках $x = 0$ та $x = a$

$$\psi_1(0) = A + 1,$$

$$\psi_2(0) = [B + C]\chi(0),$$

$$\psi_2(a) = \left[Be^{\frac{i}{\hbar}ap} + Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}\right]\chi(0),$$

$$\psi_3(a) = De^{ika}.$$

Знайдемо також і вирази для похідних

$$\frac{d\psi_1}{dx} = -ikAe^{-ikx} + ike^{ikx},$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = \left[\frac{i}{\hbar}Bpe^{\frac{i}{\hbar}xp} - \frac{i}{\hbar}Cpe^{-\frac{i}{\hbar}xp}\right]\chi(0),$$

$$\frac{d\psi_3}{dx} = ikDe^{ikx}.$$

Значення похідних у відповідних точках

$$\frac{d\psi_1}{dx}|_{x=0} = -ikA + ik,$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}|_{x=0} = \frac{i}{\hbar}p\chi(0)[B - C],$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}|_{x=a} = \left[\frac{i}{\hbar}Bpe^{\frac{i}{\hbar}ap} - \frac{i}{\hbar}Cpe^{-\frac{i}{\hbar}ap}\right]\chi(0),$$

$$\frac{d\psi_3}{dx}|_{x=a} = ikDe^{ika}.$$

Отже, наша система лінійних алгебричних рівнянь (3.10) набуде такого виду

$$\begin{cases} A+1=[B+C]\chi(0), \\ \left[Be^{\frac{i}{\hbar}ap}+Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}\right]\chi(0)=De^{ika}, \\ \frac{i}{\hbar}p\chi(0)[B-C]+ikA-ik=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A+1), \\ ikDe^{ika}-\frac{i}{\hbar}p\chi(0)\left[Be^{\frac{i}{\hbar}ap}+Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}\right]=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}De^{ika}. \end{cases} \tag{3.11}$$

Із першого рівняння системи (3.11) отримаємо

$$A=[B+C]\chi(0)-1$$

$$\frac{i}{\hbar}p\chi(0)[B-C]+ik\{[B+C]\chi(0)-1\}-ik=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}[B+C]\chi(0);$$

$$\frac{i}{\hbar}p\chi(0)B-\frac{i}{\hbar}p\chi(0)C+ik\chi(0)B+ik\chi(0)C-2ik=$$

$$=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}B\chi(0)-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}C\chi(0);$$

$$\frac{i}{\hbar}p\chi(0)B+\frac{2m\alpha}{\hbar^2}B\chi(0)+ik\chi(0)B=$$

$$=\frac{i}{\hbar}p\chi(0)C-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}C\chi(0)-ik\chi(0)C+2ik;$$

$$B=\frac{\left\{\frac{i}{\hbar}p-ik-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\right\}\chi(0)C+2ik}{\left\{\frac{i}{\hbar}p+ik+\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\right\}\chi(0)}=\frac{\alpha_1\chi(0)C+2ik}{\alpha_2\chi(0)}.$$

В останньому виразі введенні для зручності нові параметри

$$\alpha_1=\frac{i}{\hbar}p-ik-\frac{2m\alpha}{\hbar^2},$$

$$\alpha_2=\frac{i}{\hbar}p+ik+\frac{2m\alpha}{\hbar^2}.$$

Тоді

$$ikDe^{ika}-\frac{i}{\hbar}p\chi(0)\left[\frac{\alpha_1\chi(0)C+2ik}{\alpha_2\chi(0)}e^{\frac{i}{\hbar}ap}+Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}\right]=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}De^{ika};$$

$$ikDe^{ika}-\frac{i}{\hbar}p\chi(0)\frac{\alpha_1\chi(0)C+2ik}{\alpha_2\chi(0)}e^{\frac{i}{\hbar}ap}-\frac{i}{\hbar}p\chi(0)Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}De^{ika};$$

$$-\frac{i}{\hbar}pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\left(\frac{\alpha_1\chi(0)C+2ik}{\alpha_2}\right)-\frac{i}{\hbar}p\chi(0)Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}De^{ika}-ikDe^{ika};$$

$$D = \frac{\frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}ap} \left( \frac{\alpha_1 \chi(0) C + 2ik}{\alpha_2} \right) + \frac{i}{\hbar} p \chi(0) C e^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\left( \frac{2m\alpha}{\hbar^2} + 1 \right) e^{ika}}$$

Введемо ще одне позначення

$$\beta = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} + 1.$$

Одержуємо

$$\left[ \frac{\alpha_1 \chi(0) C + 2ik}{\alpha_2 \chi(0)} e^{\frac{i}{\hbar}ap} + C e^{-\frac{i}{\hbar}ap} \right] \chi(0) =$$

$$= \frac{\frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}ap} \left( \frac{\alpha_1 \chi(0) C + 2ik}{\alpha_2} \right) + \frac{i}{\hbar} p \chi(0) C e^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\beta e^{ika}} e^{ika};$$

$$\frac{\alpha_1 \chi(0) C e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + \frac{2ik e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + C e^{-\frac{i}{\hbar}ap} \chi(0) =$$

$$= \frac{\frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}ap} \left( \frac{\alpha_1 \chi(0) C + 2ik}{\alpha_2} \right)}{\beta} + \frac{\frac{i}{\hbar} p \chi(0) C e^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\beta};$$

$$\frac{\alpha_1 \chi(0) C e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + C e^{-\frac{i}{\hbar}ap} \chi(0) - \frac{ip \chi(0) C e^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta}$$

$$= \frac{p e^{\frac{i}{\hbar}ap} \alpha_1 \chi(0) C}{\beta\hbar\alpha_2} + \frac{2p e^{\frac{i}{\hbar}ap} ik}{\beta\hbar\alpha_2} - \frac{2ik e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2};$$

$$C = \frac{\frac{2p e^{\frac{i}{\hbar}ap} ik}{\beta\hbar\alpha_2} - \frac{2ik e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2}}{\chi(0) \left\{ \frac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \frac{ip e^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \frac{p e^{\frac{i}{\hbar}ap} \alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2} \right\}}$$

Останній вираз дає нам змогу визначити B шляхом підстановки

$$B = \frac{\alpha_1\chi(0)\dfrac{\dfrac{2pe^{\frac{i}{\hbar}ap}ik}{\beta\hbar\alpha_2} - \dfrac{2ike^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2}}{\chi(0)\left\{\dfrac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \dfrac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \dfrac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right\}} + 2ik}{\alpha_2\chi(0)} =$$

$$= \frac{\dfrac{2pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1 ik}{\beta\hbar\alpha_2} - \dfrac{2ik\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + 2ik\left\{\dfrac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \dfrac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \dfrac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right\}}{\alpha_2\chi(0)\left\{\dfrac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \dfrac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \dfrac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right\}} =$$

$$= \frac{2ik\left[\dfrac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2} - \dfrac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + \dfrac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \dfrac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \dfrac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right]}{\alpha_2\chi(0)\left\{\dfrac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \dfrac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \dfrac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right\}} =$$

$$= \frac{2ik\left[e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \dfrac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta}\right]}{\alpha_2\chi(0)\left\{\dfrac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \dfrac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \dfrac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right\}}.$$

Помноживши чисельник і знаменник останнього виразу на $e^{\frac{i}{\hbar}ap}$ та здійснивши певні спрощення, отримаємо

$$B = \frac{2ik\left[\dfrac{\hbar\beta - ip}{\hbar\beta}\right]}{\alpha_2\chi(0)\left\{\dfrac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap} + 1 - \dfrac{ip}{\hbar\beta} - \dfrac{p\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}\right\}} =$$

$$= \frac{\dfrac{2ik}{\hbar\beta}(\hbar\beta - ip)}{\alpha_2\chi(0)\left\{\left(1 - \dfrac{p}{\beta\hbar}\right)\dfrac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap} + 1 - \dfrac{ip}{\hbar\beta}\right\}}$$

$$= \frac{2ik(\hbar\beta - ip)}{\alpha_2\chi(0)\left\{(\beta\hbar - p)\dfrac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap} + \beta\hbar - ip\right\}}.$$

Для коефіцієнта $A$ знаходимо

$$A = \left[ \frac{2ik(\hbar\beta - ip)}{\alpha_2\chi(0)\left\{(\beta\hbar - p)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap} + \beta\hbar - ip\right\}} \right.$$

$$\left. + \frac{\frac{2pe^{\frac{i}{\hbar}ap}ik}{\beta\hbar\alpha_2} - \frac{2ike^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2}}{\chi(0)\left\{\frac{\alpha_1 e^{\frac{i}{\hbar}ap}}{\alpha_2} + e^{-\frac{i}{\hbar}ap} - \frac{ipe^{-\frac{i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \frac{pe^{\frac{i}{\hbar}ap}\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right\}} \right]\chi(0) - 1.$$

Помножимо чисельник і знаменник другого доданку в квадратних дужках на $e^{-\frac{i}{\hbar}ap}$та здійснимо певні алгебричні спрощення

$$\frac{\left(\frac{p}{\beta\hbar} - 1\right)\frac{2ik}{\alpha_2}}{\chi(0)\left\{\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + e^{-\frac{2i}{\hbar}ap} - \frac{ipe^{-\frac{2i}{\hbar}ap}}{\hbar\beta} - \frac{p\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\right\}} =$$

$$= \frac{\left(\frac{p}{\beta\hbar} - 1\right)\frac{2ik}{\alpha_2}}{\chi(0)\left\{\left(1 - \frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + \left(1 - \frac{ip}{\beta\hbar}\right)e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}\right\}}.$$

Помітивши певну симетрію між першим та другим доданками та звівши їх до подібного вигляду, а також розкривши дужки, матимемо вираз для A

$$A=\frac{\frac{2ik}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)}{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)}+\frac{\left(\frac{p}{\beta\hbar}-1\right)\frac{2ik}{\alpha_2}}{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}}-1=$$

$$=\frac{\frac{2ik}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}\right\}}{\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\right\}\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}\right\}}$$

$$+\frac{\left(\frac{p}{\beta\hbar}-1\right)\frac{2ik}{\alpha_2}\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\right\}}{\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\right\}\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}\right\}}$$

$$-1 \tag{3.12}$$

Із міркувань зручності окремо виконаємо дії у чисельнику та знаменнику

$$\frac{2ik}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}\right\}$$

$$+\left(\frac{p}{\beta\hbar}-1\right)\frac{2ik}{\alpha_2}\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\right\}=$$

$$=\frac{2ik}{\alpha_2}\left\{\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}\right.$$

$$\left.+\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)^2\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\right\}=$$

$$=\frac{2ik}{\alpha_2}\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\left(1+\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)\right.$$

$$\left.+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2\left(e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}+\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}\right)\right\};$$

$$\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\right\}\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}\right\}$$

$$=\left[\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right]^2e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)$$

$$+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2e^{-\frac{2i}{\hbar}ap};$$

Отже (3.12) набуває вигляду

$$A = \frac{\frac{2ik}{\alpha_2}\left\{\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)\left(1+\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2\left(e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}+\frac{\alpha_1}{\alpha_2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}\right)\right\}}{\left[\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right]^2 e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2 e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}} - 1;$$

Застосовуючи елементарне правило віднімання дробів, отримаємо

$$A = \frac{\frac{[2ik(\beta\hbar)^2+4kp\beta\hbar+2ip\alpha_2\beta\hbar-2ikp^2-2i\alpha_1 p^2+\alpha_2 p^2]}{\alpha_2(\beta\hbar)^2}e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}}{\left[\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right]^2 e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2 e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}}$$
$$+\frac{\frac{[2ik\alpha_2(\beta\hbar)^2+2kp\alpha_1\beta\hbar+2p\alpha_1^2\beta\hbar-\alpha_1(\beta\hbar)^2]}{(\beta\hbar\alpha_2)^2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}}{\left[\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right]^2 e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2 e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}}$$
$$+\frac{\frac{4p\alpha_1}{\beta\hbar\alpha_2}\left(\frac{k}{\alpha_2}+i\right)+\frac{2\alpha_1}{\alpha_2}\left(\frac{ik}{\alpha_2}-1\right)-\frac{2ikp}{\alpha_2\beta\hbar}\left(1+\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)-\frac{2kp^2}{(\beta\hbar)^2}\left(1+\frac{\alpha_1}{\alpha_2}+\frac{i\alpha_1}{\alpha_2^2}\right)}{\left[\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right]^2 e^{\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta\hbar}\right)\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)+\left(1-\frac{ip}{\beta\hbar}\right)^2 e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}}.$$

Відповідно до наших означень, можемо знайти коефіцієнт відбивання за формулою

$$R = |A|^2 = AA^*.$$

$A^*$ - комплексно спряжене число до A.

$$A^* = \frac{\frac{[-2ik(\beta^*\hbar)^2+4kp\beta^*\hbar-2ip{\alpha_2}^*\beta^*\hbar+2ikp^2+2i{\alpha_1}^*p^2+{\alpha_2}^*p^2]}{{\alpha_2}^*(\beta^*\hbar)^2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}}{\left[\left(1-\frac{p}{\beta^*\hbar}\right)\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\right]^2 e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta^*\hbar}\right)\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\left(1+\frac{ip}{\beta^*\hbar}\right)+\left(1+\frac{ip}{\beta^*\hbar}\right)^2 e^{\frac{2i}{\hbar}ap}}$$
$$+\frac{\frac{[-2ik{\alpha_2}^*(\beta^*\hbar)^2+2kp{\alpha_1}^*\beta^*\hbar+2p\alpha_1^{2^*}\beta^*\hbar-{\alpha_1}^*(\beta^*\hbar)^2]}{(\beta^*\hbar{\alpha_2}^*)^2}e^{\frac{2i}{\hbar}ap}}{\left[\left(1-\frac{p}{\beta^*\hbar}\right)\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\right]^2 e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta^*\hbar}\right)\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\left(1+\frac{ip}{\beta^*\hbar}\right)+\left(1+\frac{ip}{\beta^*\hbar}\right)^2 e^{\frac{2i}{\hbar}ap}}$$
$$+\frac{\frac{4p{\alpha_1}^*}{\beta^*\hbar{\alpha_2}^*}\left(\frac{k}{{\alpha_2}^*}-i\right)+\frac{2{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\left(-\frac{ik}{{\alpha_2}^*}-1\right)+\frac{2ikp}{{\alpha_2}^*\beta^*\hbar}\left(1+\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\right)-\frac{2kp^2}{(\beta^*\hbar)^2}\left(1+\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}-\frac{i{\alpha_1}^*}{\alpha_2^{2^*}}\right)}{\left[\left(1-\frac{p}{\beta^*\hbar}\right)\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\right]^2 e^{-\frac{2i}{\hbar}ap}+2\left(1-\frac{p}{\beta^*\hbar}\right)\frac{{\alpha_1}^*}{{\alpha_2}^*}\left(1+\frac{ip}{\beta^*\hbar}\right)+\left(1+\frac{ip}{\beta^*\hbar}\right)^2 e^{\frac{2i}{\hbar}ap}}$$

Комп’ютерне моделювання коефіцієнта проходження електронів через бар’єр дало наступну залежність від енергії налітаючих електронів (Рис. 3.2).

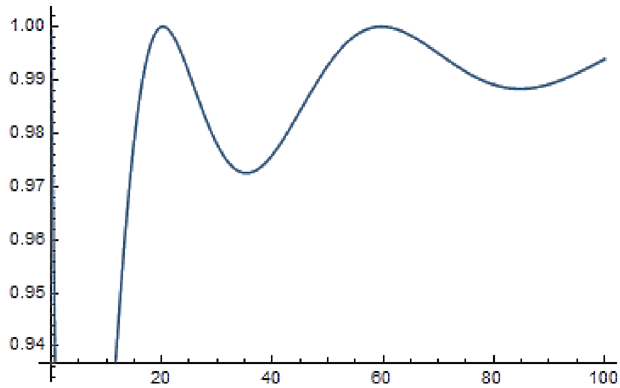


Рис. 3.2. Коефіцієнт тунелювання в магнітному полі

На Рис. 3.2. показано залежність коефіцієнта тунелювання через бар’єр від енергії налітаючого електрона, які ми отримали за допомогою комп’ютерних розрахунків на основі одержаних у роботі формул. На горизонтальній осі відкладено безрозмірну енергію електрона, а на вертикальній осі коефіцієнт тунелювання. На цьому графіку ми можемо помітити наявність резонансного максимуму, за якого прозорість бар’єра дорівнює одиниці. Нижній графік відповідає увімкненому магнітному полю в області між бар’єрами. Як видно з графіка, максимум прозорості змістився у бік збільшення енергії, що очевидно пов’язане з дією сили Лоренца на електрон. Крім того з’явився додатковий максимум у порівнянні із випадком без магнітного поля. Його появу можна пов’язати з рівнями Ландау, які виникають під час квантування руху електрона в магнітному полі.

Таким чином, тунелювання за наявності магнітного поля є складним квантовим процесом, де класичні уявлення про бар’єри і енергії не є достатніми для пояснення поведінки частинок. Магнітне поле не тільки змінює траєкторії частинок, а й може безпосередньо впливати на ймовірність квантового тунелювання через ефекти, пов’язані з фазою хвильової функції. Це явище має широке застосування в різних галузях фізики, таких як нанотехнології, квантова електроніка та теорія магнітних матеріалів, де магнітне поле може значно впливати на квантові властивості матеріалів і пристроїв.

### 3.3. Можливі застосування тунелювання в магнітному полі

Одержані залежності коефіцієнта тунелювання можуть бути використані під час розрахунку струму через шаруваті надпровідні тунельні контакти про які згадувалося на початку доповіді. Тунельний струм через такі контакти залежний від коефіцієнта тунелювання, а отже і від магнітного поля як ви щойно могли бачити. Керуючи магнітним полем ми можемо змінювати коефіцієнт тунелювання, а отже і струм через контакт. Така залежність може бути покладена в основу технології розробки датчика магнітного поля.

Явище тунелювання в квантовій механіці є важливим і широко застосовуваним у багатьох сферах сучасної науки і технології. Тунелювання – це процес, при якому частинка може проходити через потенціальні бар’єри, навіть якщо її енергія менша, ніж висота цього бар’єра. Це явище не пояснюється класичною фізикою, але є основою для багатьох квантових процесів. Ось кілька ключових напрямків, де це явище застосовується:

– тунелювання має вирішальне значення для ядерних реакцій, зокрема для термоядерного синтезу, що відбувається в зірках, у тому числі на Сонці. В умовах високих температур та тиску, ядра атомів стикаються, але через тунелювання можуть подолати потенційний бар’єр відштовхування через кулонівський заряд і об’єднатися, утворюючи нове ядро. Це явище дозволяє пояснити механізм термоядерного синтезу, при якому енергія виділяється завдяки подоланню кулонівського бар’єра за допомогою тунелювання.

– в напівпровідникових пристроях, таких як транзистори, діоди, а також в мікроелектроніці, тунелювання грає важливу роль. Наприклад: тунельний діод використовує тунелювання для досягнення високої швидкості перемикання між двома станами, що дозволяє використовувати їх у швидкісних електронних схемах; мікровимірювання в наноелектронних пристроях, де тунелювання між електродами може використовуватися для точного вимірювання заряду або потоку електронів та квантові транзистори, які використовують явище тунелювання для зменшення втрат енергії, дозволяючи працювати на нових принципах у порівнянні з традиційною електронікою;

– в квантових комп’ютерах тунелювання використовується для маніпулювання квантовими бітами (кубітами). Квантові ефекти, зокрема тунелювання, дозволяють кубітам бути в кількох станах одночасно, що підвищує обчислювальну потужність квантових комп’ютерів. Одним із важливих аспектів є квантові алгоритми для розв’язання задач, які неможливо вирішити за допомогою класичних комп’ютерів;

– у спінтроніці тунелювання використовується для маніпулювання спінами електронів, що відкриває нові можливості для створення магнітних зберігачів даних та спінових транзисторів. Тут важливе значення має тунелювання спінових орбітальних станів, що дозволяє створювати більш швидкі й енергоефективні пристрої;

– тунелювання є основою для роботи квантових сенсорів, які використовуються в квантовій метрологоії для вимірювання різних фізичних величин, таких як магнітні поля, електричні поля або час. Наприклад, тонкі тунельні детектори використовуються для точного вимірювання надмалих змін магнітних полів або навіть одиничних квантів світла, що має велике значення для розвитку квантової технології;

– у хімічних реакціях тунелювання відіграє важливу роль у ряді процесів, особливо в тих випадках, коли реакція відбувається при низьких температурах, де класичні процеси не можуть пояснити спостережувану швидкість реакції. Тунелювання дозволяє молекулам подолати енергетичний бар’єр, навіть якщо їхня кінетична енергія нижча за висоту цього бар’єра. Це особливо важливо у випадках, коли активовані комплекси (перехідні стани) мають високу енергію, і класична теорія (як-от теорія активованого комплексу) не може описати швидкість реакції на низьких температурах;

– в молекулярних електронних пристроях, таких як молекулярні транзистори або молекулярні наноструктури, тунелювання грає важливу роль у процесах електронного транспорту. Молекули в таких системах можуть переносити електрони через потенціальні бар’єри, навіть якщо класична механіка вказує на неможливість проходження таких бар’єрів. Це явище є основою багатьох сучасних технологій, зокрема в нанотехнології та молекулярній електроніці;

– в квантовій хімії тунелювання є основою для розуміння багатьох реакцій на молекулярному рівні. Відомо, що навіть на рівні атомів і молекул тунелювання може змінювати реакційні шляхи, швидкості реакцій та вихід продуктів. Для моделювання таких процесів застосовуються методи квантової хімії, які дозволяють прогнозувати ймовірність тунелювання в залежності від форми і висоти потенціального бар'єра;

– тунелювання також має велике значення в біохімії, зокрема в процесах, пов'язаних з ферментативними реакціями та метаболізмом. Одним із найвідоміших прикладів є тунелювання в хімічних реакціях, які відбуваються в активних центрах ферментів. В таких реакціях, частинки (наприклад, протони або електрони) можуть тунелювати через енергетичні бар'єри, що суттєво прискорює реакції, навіть якщо температури не достатньо високі для досягнення необхідної енергії;

– явище тунелювання також має важливе значення для генерації енергії в живих організмах, зокрема в процесах, таких як фотосинтез. Деякі молекули, що беруть участь у фотосинтетичних процесах, використовують тунелювання для швидкого перенесення електронів через мембрани клітин, що сприяє ефективному збиранню енергії з сонячного світла. В цьому контексті тунелювання може допомогти організмам адаптуватися до різних умов середовища, ефективно використовуючи доступну енергію;

– у квантових точках та наноструктурах з великими потенціальними бар'єрами тунелювання є важливим механізмом, що визначає поведінку зарядів, електронів та інших частинок. Наприклад, в наноструктурах, де діаметр бар'єра може бути на порядки менший за розміри системи, тунелювання дозволяє частинкам проникати через бар'єри, створюючи нові властивості матеріалу. Це явище є ключовим в розвитку квантових комп'ютерів, де використання тунелювання для обробки інформації може бути надзвичайно ефективним;

– у суперпровідниках явище тунелювання є основним для роботи ефекту Джозефсона. У цьому контексті електрони (або інші носії заряду) можуть тунелювати через тонкі бар’єри між двома суперпровідниками. Це явище, відоме як ефект Джозефсона, має багато застосувань, зокрема у квантових комп’ютерах, де використовується для створення квантових бітів (кубітів) в надпровідних умовах. У цьому випадку бар’єри можуть бути як фізичними (наприклад, тонка ізоляція між суперпровідниками), так і квантовими, що дозволяє досягти ефекту тунелювання навіть при великих енергетичних бар’єрах;

– у ядерній фізиці явище тунелювання застосовується для опису процесів радіоактивного розпаду, зокрема альфа-розпаду. У цих процесах ядра викидають альфа-частинку (два протони та два нейтрони), і хоча для викиду цієї частинки з ядра потрібна велика енергія для подолання кулонівського бар’єра, квантове тунелювання дозволяє частинці прориватися через бар’єр з ймовірністю, що залежить від його висоти та ширини. Це є класичним прикладом застосування тунелювання для великих потенціальних бар’єрів у ядерній фізиці;

–явище тунелювання є важливим також у космології, де воно використовується для розуміння різних процесів на ранніх етапах еволюції Всесвіту, зокрема в контексті Великого вибуху та формування космічних структур. В цих умовах тунелювання може бути причиною того, чому деякі частинки могли утворюватися чи взаємодіяти в умовах, де класичні закони фізики не давали б можливості для таких процесів.

Отже, явище тунелювання в квантовій механіці має велике значення для багатьох галузей науки і техніки. Від квантових комп’ютерів до нанотехнологій, від термоядерного синтезу до спінтроніки – тунелювання дозволяє пояснити та реалізувати нові технології, які можуть змінити наше уявлення про можливості сучасних та майбутніх технологій.

Тунелювання електронів через подвійний дельта-функційний бар’єр є важливим явищем, яке можна спостерігати в ряді квантових систем, де електрони повинні пройти через два потенціальні бар’єри, розділені відстанню, яку неможливо подолати за допомогою класичних механізмів. Це явище має численні теоретичні та практичні застосування в різних галузях науки та техніки.

У нанофізиці подвійні дельта-функційні бар’єри використовуються для моделювання квантових точок, які є важливими компонентами сучасних нанопристроїв. У таких системах електрони можуть проходити через два бар’єри (наприклад, створені за допомогою потенціалу, який можна описати через дельта-функції) та взаємодіяти з ними шляхом тунелювання. Цей процес є основою для роботи багатьох пристроїв на основі квантових точок, зокрема в квантових обчислювальних елементах, сенсорах та детекторах.

У молекулярній хімії подвійні бар’єри можуть виникати в процесах, де два потенціальні бар’єри створюються через взаємодію молекул або атомів, що утворюють певну структуру з двома розділеними енергетичними рівнями. Тунелювання електронів через такі бар’єри може визначати молекулярні реакції, наприклад, у процесах переносу електронів в органічних молекулах або при формуванні нових хімічних зв’язків.

В теорії тунелювання через подвійні дельта-функційні бар’єри також застосовується до тунельних діодів і інших напівпровідникових пристроїв. У таких системах потенціальні бар’єри можуть бути створені шляхом легування або зміни ширини і форми півпровідникових матеріалів. Коли потенціал має форму подвійного бар’єра, електрони можуть тунелювати між двома бар’єрами, що спричиняє специфічні характеристики струму-напрягу. Це явище важливе для розуміння функціонування таких пристроїв, як тунельні діоди, резонансно-іонізаційні діоди та інші.

У квантових обчисленнях подвійні дельта-функційні бар’єри можуть бути використані для створення потенціальних умов, де квантові біт (кубіти) можуть проявляти суперпозицію станів, що переходять через бар’єри. В таких системах тунелювання між двома бар’єрами дозволяє підтримувати і управляти квантовими станами, що є основою для здійснення обчислювальних операцій. Теорія тунелювання через подвійні бар’єри також допомагає розробити нові методи для розширення квантових алгоритмів.

В ядерній фізиці подвійний дельта-функційний бар’єр може бути використаний для опису процесів, що відбуваються при альфа-розпаді та інших ядерних реакціях. В таких випадках потенціал бар’єра, що обмежує альфа-частинку всередині ядра, можна наближено описати через два окремих потенціальних бар’єри. Тунелювання через такі бар’єри визначає ймовірність альфа-розпаду, тобто процес, при якому частинка пробиває бар’єр через квантове тунелювання.

В рідких кристалах та органічних молекулярних плівках, що використовуються у новітніх матеріалах, також можуть виникати подвійні бар’єри для електронів. Тунелювання через ці бар’єри має важливе значення для ефективності органічних сонячних елементів, органічних світлодіодів та інших пристроїв. Взаємодія між молекулами в плівці може створювати потенціальні бар’єри для електронів, через які вони можуть тунелювати в процесах, що визначають функціонування цих матеріалів.

Мікроскопія з тунелюванням (scanning tunneling microscopy, STM) є технікою, що використовує явище квантового тунелювання для отримання зображень поверхні матеріалів на атомарному рівні. Тунелювання електронів через подвійний дельта-функційний бар’єр може бути використано для аналізу взаємодії між атомами на поверхні, що має важливе значення для дослідження нових матеріалів, а також в нанотехнологіях, де потрібен точний контроль за розміщенням атомів і молекул.

Отже, тунелювання електронів через подвійний дельта-функційний бар’єр є важливим квантовим явищем, яке застосовується в ряді галузей науки та техніки, таких як нанотехнології, квантові обчислення, молекулярна хімія, ядерна фізика, а також у створенні новітніх пристроїв, таких як тунельні діоди та квантові сенсори. Розуміння цього явища дає можливість покращити ефективність сучасних технологій і розробити нові методи для контролю над квантовими станами в матеріалах і пристроях.

Тунелювання за наявності магнітного поля є важливим явищем у квантовій механіці, оскільки магнітне поле може суттєво змінювати ймовірність тунелювання та навіть спричиняти нові квантові ефекти, що не спостерігаються без нього. Розглянемо кілька основних областей, де тунелювання в магнітному полі має важливе застосування:

– у нанофізиці та науці про матеріали магнітне поле може значно впливати на електронні стани в наноструктурах, таких як квантові точки, нанотрубки чи нанопроводи. Тунелювання в цих структурах дозволяє розробляти нові типи пристроїв, зокрема тунельні діоди, квантові вентилі і магнітні сенсори. В таких пристроях застосування зовнішнього магнітного поля змінює енергетичні рівні або впливає на властивості тунелювання, що дозволяє точніше управляти потоком електронів або магнітними станами;

– магнітне поле в квантових комп’ютерах може використовуватися для маніпуляцій кубітами – основними одиницями квантової інформації. Тунелювання електронів або атомів в магнітному полі дозволяє здійснювати квантові обчислення на основі спінових кубітів або інших квантових станів. В таких системах магнітне поле часто необхідне для реалізації інтерференційних ефектів та контролю тунелювання через квантові бар’єри. Зокрема, в спінових тросах або топологічних кубітах, магнітне поле є критичним для стабільності кубітів і керування тунелюванням;

– тунелювання через потенціальні бар’єри в молекулярних системах, зокрема в органічних молекулярних плівках, може бути значно змінене за наявності магнітного поля. В молекулярній магнетизмі ефект тунелювання визначає процеси переносу електронів або змінення спінових станів молекул у магнітному полі. У таких системах можуть виникати нові квантові ефекти, такі як квантова магнітна тунельна ефективність (QTME), що використовуються для створення молекулярних магнітних пристроїв або квантових сенсорів;

– у надпровідних матеріалах магнітне поле може суттєво змінювати процеси тунелювання через надпровідні бар’єри, що використовується, зокрема, в надпровідних квантових інтерферометрах (SQUID) та в нанотехнологічних надпровідних схемах. Тунелювання через магнітні бар’єри в таких пристроях є основою для детекції квантових ефектів, таких як квантова магнітна гістрезис та квантовий магнітний викид. У таких системах спостерігається явища мульти-бар'єрного тунелювання або тунелювання через слабкі магнітні бар'єри;

– магнітне поле впливає на ймовірність тунелювання в контексті ефектів Холла, де магнітне поле викликає зміщення електронів через бар'єр або змінює геометрію тунелювання. Тунелювання в цьому контексті може бути використано для детектування маленьких змін у магнітному полі, вивчення магнітних властивостей матеріалів або проведення польових експериментів на рівні окремих частинок;

– магнітне поле також може змінювати процеси тунелювання в ядерних системах. Зокрема, тунелювання може відбуватися в системах з високим магнітним полем, де спінове та магнітне взаємодії є важливими для змінення ймовірності тунелювання через ядерні бар'єри. Такий ефект можна спостерігати, наприклад, у процесах ядерного синтезу або ядерного розпаду в умовах сильного магнітного поля, таких як в астрофізичних умовах або в лабораторних умовах в реакторах;

– тунелювання також є основою для вивчення квантових флуктуацій в магнітних матеріалах, де магнітне поле може допомогти вивчити фазові переходи та структуру магнітних фаз. В таких матеріалах електрони можуть тунелювати через потенціальні бар'єри, що дозволяє здійснювати детальне вивчення різних магнітних фаз та їхню стабільність в умовах квантових флуктуацій [16, с. 326].

Отже, тунелювання за наявності магнітного поля має велике значення для розвитку квантових технологій, молекулярної хімії, ядерної фізики, нанофізики, а також для створення нових матеріалів і пристроїв, таких як квантові комп'ютери, магнітні сенсори, надпровідники та квантові інтерферометри. Це явище дозволяє досліджувати та контролювати квантові стани, підвищувати ефективність технологій і відкривати нові можливості в науці та техніці.

Загалом, одержані результати можуть бути впроваджені в численні сфери сучасних технологій, включаючи квантову фізику, матеріалознавство, медичні технології та енергетику, що забезпечить нові можливості для розвитку науки і техніки.

# ВИСНОВКИ

Метою даної роботи було теоретичне дослідження залежності коефіцієнта проходження електронів крізь подвійний дельта-функційний бар’єр.

У ході досліджень було одержано наступні результати:

1. Розглянуто суть явища квантового тунелювання. Описано основні закономірності поведінки мікрочастинок під час проходження через потенціальні бар’єри.
2. Проведено теоретичний розрахунок коефіцієнта проходження електронів через подвійний дельта-функційний бар’єр.
3. Описано умови виникнення резонансного тунелювання.
4. На основі рівняння Шредінгера було проведено теоретичне дослідження коефіцієнта проходження електронів через дельта-функційний бар’єр за наявності зовнішнього магнітного поля.
5. Показано, що при увімкнені магнітного поля резонансний максимум зміщується, а також з’являється додатковий резонансний максимум. Таким чином, у результаті маємо чутливість тунельного контакту до магнітного поля, що може бути використане для створення магніточутливого сенсора.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Буданов В. Є., Буданов О. В., Суслов М. М. Класична теорія ефекту Аронова-Бома. *Проблеми машинобудування*. 2016. Т. 19, № 4. С. 51–56.

2. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підруч. для студ. ВНЗ / М-во освіти і науки, молоді та спорту України. Вид. 4-е допов. Львів : ЛНУ ім. І. Франка, 2012. 872 с.

3. Васілевський, О. М., Кучерук В. Ю. Основи теорії невизначеності вимірювань : навч. посіб. Вінниця : ВНТУ, 2012. 171 с.

4. Венгер Є. Ф., Грибань В. М., Мельничук О. В. Основи квантової механіки : навч. посіб. для студ. ВНЗ / М-во освіти і науки України. Київ : Вища шк., 2002. 286 с.

5. Висоцький В. І. Квантова механіка та її використання у прикладній фізиці : підруч. для студ. ВНЗ / Київ. нац. ун-т ім. Тараса Шевченка. Київ : Київ. ун-т, 2008. 368 с.

6. Вступ до квантової метрології : підручник / Ю. Ф. Павленко, С. І. Кондрашов, П. І. Неєжмаков [та ін.]; за ред. Ю.Ф. Павленка. Харків : ФОП Мезіна В.В., 2017. 244 с

7. Головацький В., Головацький І., Гончарук С. Вплив магнітного поля на оптичні властивості квантових точок типу II (ефект Ааронова – Бома. *Фізика та освітні технології.* 2023. № 3. С. 19–30. URL: http://journals.vnu.volyn.ua/index.php/physics/article/view/1468

8. Головацький В., Яхневич М., Чубрей М. Вплив магнітного поля та нецентральної домішки на енергетичний спектр електрона в сферичній багатошаровій наносистемі. *Журнал нано- та електронної фізики*. 2019. Т. 11, № 1. С. 01007-1-01007-5. URL: http://nbuv.gov.ua/UJRN/jnef_2019_11_1_9

9. Король А. М., Андріяшик М. В. Фізика. Механіка. Молекулярна фізика і термодинаміка. Електрика і магнетизм. Оптика. Елементи квантової механіки, фізики атома, атомного ядра і елементарних частинок : підруч. для студ. ВНЗ. Київ : ІНКОС : Центр навч. л-ри, 2006. 342 с.

10. Крук В. В., Волох Л. В. Принцип невизначеності в задачах механіки. *Електромеханічні, інформаційні системи та нанотехнології* : матеріали III Міжнар. наук.-практ. Інтернет-конф. молодих учених та студентів, м. Київ, 18 квіт. 2024 року. Київ, 2024. С. 52–55. URL: https://er.knutd.edu.ua/handle/123456789/27598

11. Осадчук О. В., Осадчук В. С., Осадчук Я. О. Дослідження реактивних властивостей тунельно-резонансного діода. *Вісник Хмельницького національного університету. Серія: Фізичні науки.* Хмельницький, 2020. Т. 1, № 4. С. 160–167. URL: http://journals.khnu.km.ua/vestnik/wp-content/uploads/2021/01/29-12.pdf

12. Осадчук В. С., Осадчук О. В. Основи наноелектроніки : навч. посіб. Вінниця : ВНТУ, 2016. 199 с.

13. Осипенко К. С., Жуйков В. Я. Принцип невизначеності Гейзенберга при оцінці рівня енергії, що генерується відновлюваними джерелами. *Технічна електродинаміка*. 2017. № 1. С. 10–16. URL: http://jnas.nbuv.gov.ua/article/UJRN-0000649894

14. Практичний курс квантової механіки : навч. посіб. / уклад. М. В. Дудик. Бровари : АНФ груп, 2022. 107 с.

15. Рувінський М. А. Про правило додавання ймовірностей у квантовій механіці. *Фізика і хімія твердого тіла*. 2005. Т. 6, № 4. С. 708–711.

16. Свідзинський А. В. Мікроскопічна теорія надпровідності : монографія / М-во освіти і науки, молоді та спорту України, Волин. нац. ун-т ім. Лесі Українки. Луцьк : ВНУ ім. Лесі Українки, 2011. 422 с.

17. Сідлецька Н. А. Тунелювання частинки з масою, залежною від координати, через потенціальний бар’єр. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія : Фізика* / Ужгород. нац. ун-т ; відп. ред. В. Різак. Ужгород, 2007. Вип. 21. С. 159–164.

18. Слєта Л. О., Іванов В. В. Квантова хімія : підруч. для студ. ВНЗ / М-во освіти і науки України. Харків : Гімназія, 2008. 444 с.

19. Ткач М. В., Сеті Ю. О., Бойко І. В. Вплив нелінійної міжелектронної взаємодії на тунелювання електронів крізь несиметричну двобар’єрну

резонансно-тунельну структуру. *Український фізичний журнал*. 2012. Т.57, № 8. С. 852–862.

20. Трофімук А. В. Використання квантових ефектів у метрології. *Мехатронні системи і комп'ютерні технології.* 2017. С. 396–397. URL: https://stud.knutd.edu.ua/bitstream/123456789/8605/1/NRMSE2017_V2_P396-397.pdf

21. Шека Д. І., Добровольський В. М., Чернячук Б. В. Залежне від напрямку спіну тунелювання електронів крізь магнітні бар'єри. *Український фізичний журнал*. 2000. № 45. С. 860–863.

22. Юхновський І. Р. Основи квантової механіки : навч. посіб. для студ. ВНЗ. Київ : Либідь, 2002. 392 с.