

**Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя**

**ПЕТРИК М.Р.**

**БОЙКО І.В.**

**МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ  
СКЛАДНИХ ПРОЦЕСІВ В НАНОСТРУКТУРАХ  
І НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ**  
(на основі високопродуктивних обчислень)

**Тернопіль 2021**

**УДК 519.6+681.3**  
**ПЗ0**

Автори:  
Петрик М.Р.  
Бойко І.В.

Рецензенти:  
доктор технічних наук, професор Сверстюк А.С.  
доктор технічних наук, доцент Пукас А.В.

Схвалено та рекомендовано до друку на засіданні вченої ради  
Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя.  
Протокол № 12 від 21 грудня 2021 р.

ПЗ0            Петрик М.Р. Моделі та методи моделювання складних процесів в наноструктурах і нанопористих середовищах (на основі високопродуктивних обчислень): монографія / Петрик М.Р., Бойко І.В. – Тернопіль : Вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя, 2021. – 140 с.

**ISBN 978-966-305-119-2**

**УДК 519.6+681.3**

В даній монографії висвітлені нові підходи до розробки високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій моделювання та складних процесів в наноструктурах і нанопористих середовищах на основі паралельних обчислень та засобів комп'ютерної математики за наявності зворотних зв'язків (feedback). Проектування розглядуваних систем ґрунтується на нових наукоємних технологіях опису об'єктів, нових обчислювальних рішеннях з урахуванням архітектури комп'ютерних систем та програмного забезпечення.

Для наукових працівників, фахівців у галузі прикладної математики, математичного моделювання, високопродуктивних паралельних обчислень та програмної інженерії, викладачів вищих навчальних закладів, аспірантів, інженерів та студентів.

**ISBN 978-966-305-119-2**

© М.Р. Петрик, І.В. Бойко .....2021  
© Тернопільський національний технічний університет  
імені Івана Пулюя .....2021

**Ternopil Ivan Puluj National Technical University**

**PETRYK M.R.**

**BOYKO I.V.**

**MODELS AND METHODS OF MATHEMATICAL  
MODELING OF COMPLEX PROCESSES IN  
NANOSTRUCTURES AND NANOPORES MEDIA**

(on basis of the high-performance calculations)

**Ternopil 2021**

**UDC 519.6+681.3  
P30**

Authors:

M.P. Petryk, I.V. Boyko

Reviewers:

Doctor of Technical Sciences, Professor Sverstyuk A.S.

Doctor of Technical Sciences, Associate Professor Pukas A.V.

This monograph highlights new approaches to the development of high-performance supercomputer modeling technologies of complex processes in nanostructures and nanoporous media based on parallel calculations and computer mathematics in the presence of feedback (feedback). Design of these systems is based on new science-intensive description technologies objects, new computing solutions based on the architecture of computer systems and software. For researchers, specialists in applied mathematics, mathematical modeling, high-performance parallel computing and software engineering, university professors, graduate students, engineers and students.

**ISBN 978-966-305-119-2**

**UDC 519.6+681.3  
P30**

Published according to the decisions of the Academic Council of Ivan Pulyuk Ternopil National Technical University (Protocol № 12 of 21.12.2021).

**ISBN 978-966-305-119-2**

© M.P. Petryk, I.V. Boyko .....2021  
© Ternopil Ivan Pulyuk National Technical University .....2021

## ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА .....	7
ВСТУП.....	8
РОЗДІЛ 1. ТЕОРІЯ ТА МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДИСИПАТИВНИХ ЯВИЩ В НАНОСТРУКТУРАХ, ПОВ'ЯЗАНИХ З ЕЛЕКТРОН-ЕЛЕКТРОННОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ .....	12
1.1. Сучасна проблематика та теоретико-математичні моделі, що писують тунельний транспорт з урахування дисипативних явищ .....	12
1.2. Гамільтоніан системи. Рівняння Шредінгера-Гросса-Пітаєвського .....	28
1.3. Пертурбаційний метод розв'язування нелінійного рівняння Гросса- Пітаєвського. Коефіцієнт прозорості ДБРТС.....	32
1.4. Теорія активної динамічної провідності плоских наноструктур.....	38
1.5. Аналіз спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів двобар'єрною резонансно-тунельною структурою з урахуванням електрон-електронної взаємодії.....	46
РОЗДІЛ 2. ТЕОРІЯ ТА МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТУНЕЛЬНОГО ТРАНСПОРТУ В НАНОСТРУКТУРАХ ЗА НАВНОСТІ ЗОВНІШНІХ ПОСТІНИХ ТА ЗМІННИХ ПОЛІВ.....	57
2.1. Гамільтоніан системи електронів у відкритих резонансно-тунельних структурах з постійними поздовжнім електричним та поперечним магнітним полями. Квазістаціонарні стани системи .....	58
2.2. Квазістаціонарні стани та активна динамічна провідність електронів у моделі відкритої активної зони каскаду ККЛ у поперечному магнітному полі. Метод апроксимації ефективного потенціалу .....	66

2.3. Активна динамічна провідність та відносна інтегральна інтенсивність випромінювання у відкритій моделі окремого каскаду ККЛ у поперечному магнітному полі .....	75
2.4. Властивості електронних квазістаціонарних станів та активної динамічної провідності каскаду квантового каскадного лазера в поперечному магнітному полі .....	79
РОЗДІЛ 3. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ В ЗАДАЧАХ АДСОРБЦІЇ ЗІ ЗВОРОТНІМИ ВПЛИВАМИ В НЕОДНОРІДНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ.....	87
3.1. Огляд досліджень. ....	87
3.2. Основні підходи розробки математичних моделей адсорбції. ....	88
3.3. Нелінійна модель адсорбції в обмеженому нанопористому середовищі .....	93
3.4. Крайова задача адсорбції в напівобмежених неоднорідних багатокомпонентних нанопористих середовищах.....	101
3.5. Алгоритми обчислення компонентів матриці впливу .....	122
Висновки .....	128
Список використаних джерел .....	131

## ПЕРЕДМОВА

Розвиток нанофізики та суміжних наук за останні десятиліття привів не лише до нових фундаментальних знань академічного характеру, а й до створення нових нанотехнологій з унікальними прецизійними характеристиками таких наноприладів, як квантові каскадні лазери, детектори, нанопористі середовища. У зв'язку з винятковими можливостями наноприладів у фізиці, хімії, техніці, біології, медицині та в інших науках термін “нано” вийшов далеко за лексикон фізиків-професіоналів і став часто вживаним навіть політиками.

Одними з снових галузей нанотехнологій, що інтенсивно розвиваються є створення квантових каскадних лазерів (ККЛ) і квантових каскадних детекторів (ККД), які працюють в актуальному терагерцовому діапазоні частот електромагнітних хвиль та багатокomпонентні нанопористі структури типу цеолітів молекулярного транспорту в системах очищення газів та декарбонізації повітря та ін. Достатньо розвинена теорія фізичних процесів, що відбуваються при проходженні заряджених квазічастинок крізь каскади багат шарових резонансно-тунельні наноструктури (РТС) з полями електричної та електромагнітної природи, а також розвиток методів математичного моделювання цих процесів є надійною основою для вибору їх параметрів, що дозволить оптимізувати роботу таких наносистем.

Розроблені методологія дослідження властивостей квазістаціонарних станів та динамічної провідності частинок у відкритих РТС дозволяє оптимізувати геометричну конфігурацію активної зони каскадів ККЛ і ККД, поліпшуючи їх робочі характеристики. Крім того, розвиток методів математичного моделювання нанодифузійних процесів має назвичайно важливе значення для технологічних процесів і вдосконалення систем очищення відпрацьованих газів та зниження глобального потепління. Розділи 1 і 2 написані Бойком І.В., розділ 3 – Петриком М.Р.

## ВСТУП

На сучасному етапі розвитку нанотехнологій значне місце в дослідженнях приділяється таким наноструктурам та наноприладам як квантові каскадні лазери та квантові каскадні детектори.

Ідея функціонування ККЛ вперше була запропонована в 1972 р. у роботах Казарінова і Суріса [1, 2]. На відміну від звичайних напівпровідникових лазерів, принцип роботи яких ґрунтується на випромінюванні електромагнітних хвиль за рахунок міжзонних переходів та рекомбінації електронно-діркових пар, в цих роботах пропонувалося реалізувати роботу лазера на внутрішньозонних оптичних квантових переходах між електронними КСС, які виникають внаслідок розмірного квантування у плоских напівпровідникових наноструктурах.

Новий принцип роботи квантового каскадного лазера має ряд переваг над іншими напівпровідниковими лазерами.

По-перше, довжина хвилі випромінювання ККЛ не залежить від ширини забороненої зони напівпровідника, а залежить в основному від товщин шарів квантових ям активної області каскаду.

По-друге, оскільки при тунелюванні крізь активну зону каскадів електрон залишається у зоні провідності, то він може генерувати не лише один, але й велику кількість фотонів.

По-третє, внутрішньозонні переходи характеризуються швидкою динамікою носіїв струму, що дає значні можливості для оптимізації функціонування ККЛ за цим параметром.

Незважаючи на усвідомлення експериментаторами ексклюзивних перспектив нано-лазера, пройшло більше двох десятиліть, перш ніж у 1994р. робочою групою Фейста й Капассо було створено перший працюючий квантовий каскадний лазер [3]. Основною проблемою, з якою тоді зіткнулись експериментатори, був такий вибір геометричного дизайну активної зони й інжектора каскаду, які б забезпечували потрібні робочі характеристики ККЛ з мінімальними витратами енергії. З цією метою створювалися періодично



повторювані надгратки – каскади, перпендикулярно до площин шарів яких прикладалось постійне електричне поле, що дозволяло узгоджувати між собою роботу сусідніх каскадів ККЛ. Починаючи з ранніх робіт [4–10], кожен окремий каскад ККЛ мав однотипну структуру, що складалася з активної робочої зони, якою слугувала дво-, три- або чотириямна резонансно-тунельна структура, а також з багат шарової РТС, яка відігравала роль так званого інжектора, що відповідав за електронний транспорт між сусідніми каскадами.

Якщо перші ККЛ працювали лише при температурах рідкого азоту, то тепер уже існують такі, які успішно функціонують і при кімнатних температурах [11–18].

Великий інтерес до ККЛ у значній мірі зумовлений можливостями їх застосування для роботи у атмосферних “вікнах прозорості” середнього інфрачервоного діапазону (4–16 мкм). Зокрема ці наноприлади важливі для високошвидкісних систем зв’язку, оскільки вплив турбулентності атмосфери на поглинання електромагнітного випромінювання у цьому діапазоні є значно меншим порівняно з видимим та ближнім інфрачервоними діапазонами.

Ще один новий напрямок у нанofізичі започаткувала експериментальна реалізація ККД на основі плоских РТС як базових елементів каскадів цих наноприладів [19–23].

Незважаючи на значний прогрес у експериментальних дослідженнях ККЛ та ККД, подальше вдосконалення їх характеристик неможливе без детального з’ясування особливостей фізичних процесів, які відбуваються у відкритих багат шарових РТС, що слугують їх складовими частинами. Основні труднощі теорії фізичних процесів у ККЛ та ККД пов’язані з тим, що доводиться мати справу з тунелюванням електронів крізь відкриті наногетеросистеми у постійних електричних та магнітних полях з урахуванням взаємодії електронів між собою та з високочастотним електромагнітним полем. Відсутність розвинутої теорії взаємодії електронів у відкритих РТС з класичними і квантованими полями зумовила те, що при конструюванні ККЛ і ККД експериментатори обмежувалися оцінками енергетичного спектру електронів у

грубих закритих моделях. З цієї причини властивості РТС відносно поглинання чи випромінювання електромагнітного поля в більшості робіт [24-27] виконувалися на основі аналізу сил осциляторів квантових переходів. Що ж до адекватної відкритим РТС фізичної величини активної динамічної провідності, то внаслідок згаданих математичних проблем теорія здебільшого будувалася на основі грубих  $\delta$ -бар'єрних моделей у роботах [28–33]. На основі  $\delta$ -бар'єрних моделей у роботах [34–43] були вивчені властивості електронних КСС та розвинута теорія активної провідності відкритими багат шаровими РТС. Однак пізніше виявилось [35], що  $\delta$ -бар'єрні моделі завищують величини резонансних енергій на десятки відсотків, а резонансні ширини – у десятки разів у порівнянні з моделлю прямокутних потенціалів. Тому  $\delta$ -бар'єрна модель не претендувала на порівняння з експериментом, а могла бути застосованою лише для якісних оцінок.

Перші експериментальні дослідження тунелювання електронів у поперечному магнітному полі було здійснено близько 15 років тому в роботі [36] для одно- та двобар'єрних РТС. У той же час було виконано перші теоретичні оцінки впливу магнітного поля на стаціонарний електронний спектр у наносистемах [37, 38].

Щодо впливу поперечного магнітного поля на функціонування ККЛ, то ці питання детально вивчалися в експериментальній роботі [39], де одночасно були виконані теоретичні оцінки у межах грубої закритої моделі. Експериментально було виявлено, що збільшення напруженості магнітного поля зменшує інтенсивність лазерного випромінювання, а потім і припиняє роботу лазера. Теоретична модель, застосована авторами, не пояснювала суті спостережуваної картини і навіть знаходилась у протиріччі з експериментом, що і відмічали автори роботи [18]. Поведінка ККЛ у поперечному магнітному полі так і залишалася теоретично не з'ясованою до цього часу.

Завдання цього дослідження також полягає в тому, щоб розвинути теорію електронного транспорту крізь плоску відкриту багат шарову РТС як каскад ККЛ, що знаходиться в поздовжньому електричному і поперечному магнітному

полях. У моделі окремого відкритого каскаду ККЛ буде досліджено резонансні енергії і резонансні ширини квазістаціонарних станів електрона, а також розраховано і проаналізовано властивості активної динамічної провідності у залежності від напруженості поперечного магнітного поля.

Якість математичних моделей складних адсорбційних процесів для сучасних кіберфізичних систем поглинання викидів в атмосферу з урахуванням нанофізичних факторів зворотного зв'язку визначає їх ефективність. Через складність процесів та недосконалість підходів їх моделювання дослідження яких нанопроцесів більше обмежені інтегральним рівнем без урахування макро- і взаємодій, спрощеним емпіричним описом механізмів адсорбційної рівноваги, неоднорідностей середовищ та ін. [45–58]. Це звужує можливість моделювання, не забезпечення цілісності та повноти уявлень про внутрішню кінетику, недостатність врахування нелінійної взаємодії у середовищах мікропотоків у нанопорах частинок та ін.

У продовження досліджень [48–68] у монографії також обґрунтовано та розроблено висопродуктивні методи математичного моделювання адсорбції газів в неоднорідних багатоскладових середовищах на основі нелінійної ізотерми Ленгмюра, що найповніше описує фактори зворотної взаємодії та механізми адсорбційної рівноваги для опису реальних високотехнологічних наноадсорбційних систем. Для моделювання складного адсорбційного переносу в неоднорідних середовищах використано високопродуктивні методи операційного числення Гевісайда. Це надало змогу отримати високошвидкісні аналітичні розв'язки системи лінеаризованих моделей, що підвищує якість розпаралелювання обчислень.

## РОЗДІЛ 1

# ТЕОРІЯ ТА МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДИСИПАТИВНИХ ЯВИЩ В НАНОСТРУКТУРАХ, ПОВ'ЯЗАНИХ З ЕЛЕКТРОН-ЕЛЕКТРОННОЮ ВЗАЄМОДІЮ

### 1.1. Сучасна проблематика та теоретико-математичні моделі, що писують тунельний транспорт з урахування дисипативних явищ

Після створення квантових каскадних лазерів (ККЛ) та детекторів (ККД) значна частина експериментальних та теоретичних робіт у галузі нанофізики присвячена дослідженню багатошарових резонансно-тунельних структур, що використовуються як їх активні елементи. Фізичною основою функціонування більшості наноприладів є резонансне тунелювання стаціонарного моноенергетичного пучка електронів крізь РТС як відкриту систему.

Принципово нові можливості виникають за умов реалізації когерентного тунелювання, яке безпосередньо пов'язане з явищем квантової інтерференції електронів й виникненням квазістаціонарних станів, що характеризуються резонансними енергіями та ширинами.

Взаємодія електронів з електромагнітним полем при їх проходженні крізь РТС [41–43] переважно досліджувалася у рамках найпростіших моделей, зокрема в  $\delta$ -бар'єрній. Проте в реальній ситуації при вивченні процесів резонансного тунелювання та квантової інтерференції з'являється потреба врахування взаємодії між електронами. З метою покращення параметрів наноприладів дослідники намагаються досягнути якомога більшої провідності РТС, що досягається на структурах з вузькими енергетичними зонами. У зв'язку з цим зміщення резонансного рівня за рахунок міжелектронної взаємодії на величину малу порівняно з енергією електрона  $E_n$ , але співмірну з шириною резонансного рівня  $\Gamma_n$  ( $\Gamma_n \ll E_n$ ), різко змінює резонансний струм. Саме тому для оптимізації роботи ККЛ варто вивчити питання про те, на скільки резонансне тунелювання є чутливим до взаємодії між електронами.

Перші теоретичні роботи з урахуванням впливу електрон-електронної взаємодії на тунелювання електронів крізь РТС були виконані для найпростішої двобар'єрної наноструктури, тобто, так званого, резонансно-тунельного діода [33–38] здебільшого у рамках  $\delta$  - бар'єрної моделі.

У роботах [25–28] врахування міжелектронної взаємодії здійснювалося у моделі Хартрі-Фока. Вважалося, що на одновимірну плоску квантову яму з двома однаковими  $\delta$  - подібними потенціальними бар'єрами в точках  $z = 0$  та  $z = b$  зліва падає стаціонарний моноенергетичний пучок електронів з масою  $m$  та енергією  $E$ . При цьому вважалося, що електрони взаємодіють між собою лише всередині квантової ями.

У наближенні Хартрі-Фока рівняння Шредінгера такої системи приймає вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + \alpha[\delta(z) + \delta(z-b)]\Psi(z) + U(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad (1.1)$$

$$U(z) = \int V(z-z') |\Psi(z')|^2 dz', \quad (1.2)$$

де  $U(z)$  – самоузгоджений потенціал,  $V(z)$  – енергія взаємодії між електронами,  $\alpha$  – потужність бар'єра. Для спрощення міжелектронна взаємодія вважається локальною [65, 66]:

$$V(z-z') = \nu \delta(z-z'), \quad (1.3)$$

де  $\nu$  – потенціал міжелектронної взаємодії.

Тоді рівняння (1.1) приймає вигляд нелінійного рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + \alpha[\delta(z) + \delta(z-b)]\Psi(z) + \nu |\Psi(z)|^2 \Psi(z) = E\Psi(z). \quad (1.4)$$

Граничні умови, що описували потік електронів зліва на ДБРТС, їх відбиття у область  $z < 0$  та вихід в область  $z > b$ , мають вигляд:

$$\begin{cases} \Psi(z)|_{z=z_p-0} - \Psi(z)|_{z=z_p+0} = 0; \\ \frac{d\Psi(z)}{dz}\bigg|_{z=z_p+0} - \frac{d\Psi(z)}{dz}\bigg|_{z=z_p-0} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \Psi(z_p), \end{cases} \quad (1.5)$$

де  $p = 0, 1$  і  $z_0 = 0, z_1 = b$ .

Розв'язуючи рівняння (1.4), автори робіт [15, 16] використали припущення, що нелінійний доданок у рівнянні (1.4) можна вважати малим. Тоді розв'язки рівняння (1.4) можна шукати у вигляді:

$$\Psi(z) = A(z)e^{ikz} + B(z)e^{-ikz}, \quad (k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}), \quad (1.6)$$

де  $A(z)$  і  $B(z)$  – слабоосцилюючі комплексні функції від  $z$ . При цьому швидкість зміни функцій  $A(z)$  і  $B(z)$  пропорційна величині нелінійного доданка.

Після підстановки розв'язку (1.6) в рівняння (1.4) й усереднення за швидкоосцилюючими функціями ( $\exp(\pm ikz)$ ) автори отримали систему рівнянь для функцій  $A(z)$  і  $B(z)$ :

$$\begin{cases} \frac{dA(z)}{dz} = \frac{\nu mA(z)}{ik\hbar^2} (|A(z)|^2 + 2|B(z)|^2); \\ \frac{dB(z)}{dz} = -\frac{\nu mB(z)}{ik\hbar^2} (|B(z)|^2 + 2|A(z)|^2), \end{cases} \quad (1.7)$$

яка розв'язувалася методом теорії збурень у першому порядку [65, 66], а також для порівняння чисельно [37, 38]. Функції  $|A(z)|^2$  і  $|B(z)|^2$  у рівнянні (1.7)

замінювалися відомими функціями  $|A_0|^2$  і  $|B_0|^2$ , які знаходились як розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера для невзаємодіючих електронів:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_0(z)}{dz^2} + \alpha[\delta(z) + \delta(z-b)]\Psi_0(z) = E\Psi_0(z), \quad (1.8)$$

з граничними умовами (1.5):

Враховуючи це, розв'язок системи рівнянь (1.7) приймає вигляд:

$$A(z) = A_0 \exp\left\{-\frac{i\nu kz}{2E}(|A_0|^2 + 2|B_0|^2)\right\}; \quad B(z) = B_0 \exp\left\{\frac{i\nu kz}{2E}(|B_0|^2 + 2|A_0|^2)\right\}. \quad (1.9)$$

Знаючи хвильову функцію  $\Psi(z)$ , що є розв'язком рівняння (1.4) [67, 68], знаходився резонансний струм  $j(E)$  через наноструктуру:

$$j(E) = -\frac{ie\hbar}{2m} \left[ \Psi^*(z) \frac{d\Psi(z)}{dz} - \Psi(z) \frac{d\Psi^*(z)}{dz} \right] = \quad (1.10)$$

$$= \frac{e\hbar k}{2m} [|A_0|^2 - |B_0|^2] \left\{ 2 + \frac{\nu}{2E} (|A_0|^2 + |B_0|^2) + \frac{i\nu}{4E} (A_0 B_0^* e^{2ikz} - B_0 A_0^* e^{-2ikz}) \right\}.$$

В роботі [65] за розв'язками (1.6), з врахуванням (1.9) аналітично досліджувався коефіцієнт прозорості  $D(E) = j_+(E)/j_0(E)$  потоку взаємодіючих між собою електронів крізь ДБРТС. Тут  $j_0(E)$  і  $j_+(E)$  – густини струму, що створюються потоками падаючих на ДБРТС і тунелюючих крізь неї електронів відповідно. Отримані результати дали змогу виконати аналіз вольт-амперної характеристики, умов виникнення гістерезису та його особливостей у залежності від фізичних параметрів резонансно-тунельного діода. За результатами дослідження було зроблено висновок, що явище гістерезису реалізується, якщо резонансний струм перевищує деяке критичне значення, що пропорційне квадрату

ширини резонансного рівня  $\Gamma_n$ . Подібні результати були отримані в більш ранній роботі з використанням методу Швінгера-Келдиша для нерівноважних функцій Гріна [69].

Значно більше робіт [30–41] присвячено розв’язуванню нелінійного рівняння Шредінгера (1.4) в теорії бозе-систем, де воно виникає при розгляді явища тунелювання Бозе-Ейнштейнівського конденсату крізь потенціальні бар’єри. Відмінність цих робіт від попередніх лише формальна, бо полягає у тому, що під  $\nu$  стосовно моделі розуміється коефіцієнт, який має розмірність енергії, а замість енергії  $E$  фігурував хімічний потенціал  $\mu$  або ж енергія частинок Бозе-Ейнштейнівського конденсату, що падають на структуру зліва.

Автори робіт [30, 31] узагальнили й доповнили теоретичний підхід, що був використаний у роботі [35]. Як наслідок було отримано розв’язки рівняння (1.4) у вищих порядках теорії збурень й було показано, що наближення першого порядку є недостатнім для повного з’ясування властивостей коефіцієнта прозорості.

Розроблений метод полягає в тому, що рівняння (1.4) розглядається за умови, що коефіцієнт  $\nu$ , який характеризує міжелектронну взаємодію, малий у порівнянні з енергією падаючих на структуру частинок ( $\nu/E \ll 1$ ). Тоді, застосовуючи теорію збурень за цим параметром малості, нелінійне рівняння (1.4) приймає вигляд:

$$\frac{\hbar^2}{2mE} \left\{ \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z_1^2} + 2 \frac{\nu}{E} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z_1 \partial z_2} + \dots \right\} + \left( 1 - \frac{\alpha}{E} [\delta(z) + \delta(z-b)] \right) \Psi(z) = \frac{\nu}{E} |\Psi(z)|^2 \Psi(z). \quad (1.11)$$

Рівняння (1.11) далі розв’язується методом теорії збурень. Знерозмірюючи його за малим параметром  $\nu/E \ll 1$ , хвильову функцію  $\Psi(E)$  можна розкласти у ряд:



$$\Psi(z) = \Psi_0(z) + \frac{\nu}{E} \Psi_1(z) + \left(\frac{\nu}{E}\right)^2 \Psi_2(z) \dots \quad (1.12)$$

Тоді рівняння для апроксимованої функції  $\Psi(E)$  в нульовому порядку теорії збурень збігається з рівнянням (1.8), розв'язки якого мають вигляд:

$$\Psi_0(z_1, z_2) = A(z_2)e^{ikz_1} + B(z_2)e^{-ikz_1}. \quad (1.13)$$

У наступному порядку отримується неоднорідне лінійне диференційне рівняння для хвильової функції  $\Psi_1(z)$ :

$$\frac{\hbar^2}{2mE} \frac{\partial^2 \Psi_1(z)}{\partial z_1^2} + \Psi_1(z) = \frac{\nu}{E} |\Psi_0(z)|^2 \Psi_0(z) - \frac{2\nu}{Ek^2} \frac{\partial^2 \Psi_0(z)}{\partial z_1 \partial z_2}, \quad (1.14)$$

або у розгорнутому вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2mE} \frac{\partial^2 \Psi_1(z)}{\partial z_1^2} + \Psi_1(z) = \frac{\nu}{E} \left[ |A(z_2)|^2 + |B(z_2)|^2 + A(z_2)B^*(z_2)e^{2ikz_1} + A^*(z_2)B(z_2)e^{-2ikz_1} \right] \times \\ \times (A(z_2)e^{ikz_1} + B(z_2)e^{-ikz_1}) - \frac{2i\nu}{kE} \left( \frac{dA(z_2)}{dz_2} e^{ikz_1} - \frac{dB(z_2)}{dz_2} e^{-ikz_1} \right). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Після виконання у рівнянні (1.15) усереднення за швидкоосцилюючими функціями  $e^{ikz_1}$  і  $e^{-ikz_1}$  отримується така система рівнянь:

$$\begin{cases} A(z_2)(|A(z_2)|^2 + 2|B(z_2)|^2) = \frac{2i}{k} \frac{dA(z_2)}{dz_2}; \\ B(z_2)(2|A(z_2)|^2 + |B(z_2)|^2) = -\frac{2i}{k} \frac{dB(z_2)}{dz_2}, \end{cases} \quad (1.16)$$

яка є морфологічно аналогічною до системи (1.7).

У роботах [30, 31] розв'язок системи (1.16) шукався у формі:

$$A(z_2) = a_1 e^{ia_2}; B(z_2) = b_1 e^{ib_2}, \quad (1.17)$$

де  $a_1; b_1$  – константи, які визначаються з граничних умов (1.5),  $a_2 = a_2(z_2); b_2 = b_2(z_2)$ . Тоді з (1.16) отримується:

$$\begin{aligned} a_1^2 + 2b_1^2 &= -\frac{2}{k} \frac{da_2(z)}{dz_2}; \quad a_2(z_2) = -\frac{k}{2}(a_1^2 + 2b_1^2)z_2; \\ 2a_1^2 + b_1^2 &= \frac{2}{k} \frac{db_2(z)}{dz_2}; \quad b_2(z_2) = \frac{k}{2}(2a_1^2 + b_1^2)z_2. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Тепер функція  $\Psi(z)$  знайдена у першому наближенні. Діючи далі аналогічним способом, шукану хвильову функцію можна отримати у вищих порядках теорії збурень, хоча аналітичні вирази, які отримуються при цьому, виявляються надто громіздкими.

Практично хвильова функція розраховувалася до четвертого порядку теорії збурень включно [40]. При обчисленні коефіцієнта прозорості  $D(E)$  для кожного наближення було виявлено, що його значення при однакових енергіях дещо відрізняються і зі збільшенням порядку наближення вони виходять на насичення.

У роботах [22–28] було знайдено точний розв’язок рівняння типу (1.4) у вигляді аналітичних функцій і проаналізовано властивості коефіцієнта прозорості  $D(E)$  при резонансному тунелюванні бозе-конденсату крізь прямокутний потенціальний бар’єр висотою  $U_0$  і шириною  $2b$ . У цій моделі вважалося, що ефективна маса частинок Бозе-Ейнштейнівського конденсату є постійною і однаковою як у бар’єрі, так і поза ним.

Отже, у області бар’єру ( $-b \leq z \leq b$ ) розв’язувалося часовозалежне нелінійне рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) + \nu |\Psi(z,t)|^2 \right) \Psi(z,t), \quad (1.19)$$

розв'язок якого вибирався у вигляді:

$$\Psi(z,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi(z). \quad (1.20)$$

Тоді з (1.19), з врахуванням (1.20) отримується стаціонарне нелінійне рівняння Шредінгера з гамільтоніаном типу Гросса-Пітаєвського

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \nu |\Psi(z)|^2 + U(z) - E \right) \Psi(z) = 0. \quad (1.21)$$

Розв'язок рівняння (1.21) подавався у роботах [32–38] у комплексному вигляді:

$$\Psi(z) = \sqrt{S(z)} e^{i\Phi(z)}. \quad (1.22)$$

При цьому загальний комплексний розв'язок рівняння (1.21) за умови постійності потенціалу  $U(z) = U_0$  визначатиметься з рівняння:

$$\frac{d\Phi(z)}{dz} = \frac{\alpha}{S(z)} \quad (1.23)$$

де функція

$$S(z) = \varepsilon - \frac{\hbar^2}{\nu m} \eta^2 [dn(\eta z + \delta|p)]^2 \quad (1.24)$$

визначена як функція Якобі  $dn$  з дійсним періодом  $2K(p)$ , де  $K(p)$  – повний еліптичний інтеграл першого роду, а  $p$  – еліптичний параметр [39]. Дійсні параметри  $\alpha, p, \varepsilon, \eta$  і  $\delta$  повинні задовольняти співвідношення:

$$E = U_0 + \frac{3}{2}\nu\varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m}(2-p)\eta^2, \quad (1.25)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\hbar^2}{\nu m} \eta^4 \varepsilon (p-1) + \alpha^2 \right) + \nu \varepsilon^3 - (E - U_0) \varepsilon^2 = 0. \quad (1.26)$$

Оскільки в цій моделі взаємодія поза квантовою ямою відсутня, то для областей  $z < -b$  і  $z > b$  в рівнянні (1.21), аналогічно до робіт [25–28] нехтувалося нелінійним доданком. Отже, повна хвильова функція  $\Psi(z)$  визначається як:

$$\Psi(z) = \begin{cases} Ae^{ikz} + Be^{-ikz}, & z < -b \\ \sqrt{S(z)}e^{i\Phi(z)}, & |z| \leq b \\ Ce^{ikz}. & z > b \end{cases} \quad (1.27)$$

Ця хвильова функція і потік її густини повинні бути скінченими і неперервними при  $z = \pm b$ . Тоді з граничних умов при  $z = +b$ , з врахуванням (1.24), отримується система рівнянь:

$$\begin{cases} \sqrt{S(b)}e^{i\Phi(b)} = Ce^{ikb}, \\ \frac{1}{\sqrt{S(b)}} \left( \frac{1}{2}S'(b) + i\alpha \right) e^{i\Phi(b)} = ikCe^{ikb}, \quad \left( S'(b) = \frac{dS(z)}{dz} \Big|_{z=b} \right), \end{cases} \quad (1.28)$$

з якої отримується співвідношення:

$$\frac{1}{2} S'(b) + i\alpha = ik S(b) \quad (1.29)$$

еквівалентне (у силу дійсності функції  $S(z)$ ) умовам:

$$S'(b) = 0 \quad (1.30)$$

і

$$\alpha = kS(b). \quad (1.31)$$

З граничних умов при  $z = -b$  отримується ще одна система рівнянь:

$$\begin{cases} Ae^{-ikb} + Be^{ikb} = \sqrt{S(-b)} e^{i\Phi(-b)}, \\ ik(Ae^{-ikb} - Be^{ikb}) = \frac{1}{\sqrt{S(-b)}} \left( \frac{1}{2} S'(-b) + i\alpha \right) e^{i\Phi(-b)}, \end{cases} \quad (1.32)$$

з якої, з урахуванням (1.22) і (1.31), отримуються коефіцієнти  $A$  і  $B$ :

$$\begin{cases} A = \frac{e^{ikb}}{2\sqrt{S(0)}} \left[ S(-b) + S(b) - i \frac{S'(0)}{2k} \right] e^{i\Phi(0)}, \\ B = \frac{e^{-ikb}}{2\sqrt{S(0)}} \left[ S(-b) - S(b) + i \frac{S'(0)}{2k} \right] e^{i\Phi(0)}, \end{cases}, \quad (1.33)$$

що визначає коефіцієнт відбивання від структури:

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{|S(-b) - S(b)|^2 + S'(-b)/(4k^2)}{|S(-b) + S(b)|^2 + S'(-b)/(4k^2)}, \quad (1.34)$$

та коефіцієнт її прозорості:

$$D = 1 - R = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{S(b)}{|A|^2} = \frac{4S(b)S(-b)}{|S(-b) + S(b)|^2 + S'(-b)/(4k^2)}. \quad (1.35)$$

Для визначення невідомих параметрів  $\alpha, p, \varepsilon, \eta$  і  $\delta$  рівностей (1.25) і (1.26) недостатньо, тому додатково використовується умова (1.30), що з урахуванням властивостей функцій Якобі має вигляд:

$$-2\varphi\eta p \operatorname{dn}(u|p) \operatorname{sn}(u|p) \operatorname{cn}(u|p) = 0, \quad u = \eta b + \delta. \quad (1.36)$$

Оскільки функція  $\operatorname{dn}(u|p)$  завжди приймає ненульові значення, то розв'язки  $\delta$  рівняння (1.36) знаходяться як нулі функцій  $\operatorname{sn}(u|p)$  або  $\operatorname{cn}(u|p)$ .

Тоді в першому випадку отримується рівняння:

$$\operatorname{sn}(\eta b + \delta|p) = 0, \quad (1.37)$$

розв'язком якого є числа

$$\delta = (2j + 1)K(p) - \eta b, \quad (1.38)$$

де  $j$  – цілі числа, і тоді, оскільки  $\operatorname{dn}^2(\eta b + \delta|p) = \operatorname{dn}^2(2jK(p)|p) = 1$

$$S(b) = \varepsilon - \frac{\hbar^2}{\nu m} \eta^2, \quad (1.39)$$

У другому випадку отримується рівняння

$$\operatorname{cn}(\eta b + \delta|p) = 0, \quad (1.40)$$

звідки  $\delta$  знову визначаються так само як і в (1.37), а

$$S(b) = \varepsilon - (1 - p) \frac{\hbar^2 \eta^2}{\nu m}. \quad (1.41)$$

Тепер, для заданих значень енергії  $E$ , амплітуди падаючої хвилі  $|A|$ , величини  $p, \varepsilon$  повністю визначаються з рівностей (1.25), (1.26) та системи рівнянь (1.32).

Позиції резонансів у шкалі енергій визначаються очевидною умовою  $D = 1$ , що враховуючи рівності (1.34) чи (1.35), дає умови:

$$S'(-b) = 0, \quad (1.42)$$

$$S(-b) = S(b). \quad (1.43)$$

Тепер умова (1.42) набуває вигляду:

$$S'(-b) = -2\varphi\eta p \operatorname{cn}(u|p) \operatorname{sn}(u|p) \operatorname{cn}(u|p) = 0, \quad u = -\eta b + \delta \quad (1.44)$$

звідки знову отримуються значення  $\delta$  як нулі функцій  $\operatorname{sn}(u|p)$  або  $\operatorname{cn}(u|p)$ , проте умову (1.43) задовольняють лише нулі функції  $\operatorname{sn}(u|p)$ , що дає

$$-2\eta b + 2jK(p) = lK(p), \quad (1.45)$$

де  $l$  – ціле число, звідки

$$\eta = \frac{K(p)}{b} n, \quad n = l - j. \quad (1.46)$$

У випадку резонансних енергій, коли прозорість бар'єра близька до одиниці, у області зліва від бар'єра ( $z < -b$ ) відсутня відбита хвиля, то  $B = 0$  і з використанням (1.41), (1.42) і (1.44) отримується:

$$|A|^2 = S(-b) = S(b) = \begin{cases} \varepsilon - \frac{\hbar^2 \eta^2}{\nu m}, & \text{випадок 1} \\ \varepsilon - (1-p) \frac{\hbar^2 \eta^2}{\nu m}, & \text{випадок 2} \end{cases} \quad (1.47)$$

або

$$\varepsilon(p) = \begin{cases} |A|^2 - \frac{\hbar^2 \eta^2}{\nu m}, & \text{випадок 1} \\ |A|^2 + (1-p) \frac{\hbar^2 \eta^2}{\nu m}, & \text{випадок 2} \end{cases} \quad (1.48)$$

З використанням залежностей (1.47) та (1.25), (1.26) отримується вираз для резонансної енергії у залежності від параметра  $p$  і цілого числа  $n$ :

$$E_R(p) = U_0 + \frac{3}{2} \nu |A|^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{K^2(p)}{b^2} n^2 \cdot \begin{cases} (1+p), & \text{випадок 1} \\ (1-2p), & \text{випадок 2} \end{cases}, \quad E_R(p) \geq 0. \quad (1.49)$$

Еліптичний параметр  $p$  визначається підстановкою виразів (1.47) і (1.48) у (1.26).

У першому випадку отримується:

$$pK^4(p) = \nu |A|^2 \left( U_0 + \nu |A|^2 \right) \frac{2m^2 b^4}{\hbar^2 n^4}, \quad (1.50)$$

де для малих значень параметра  $p$  ліва частина рівності може бути апроксимована як



$$pK^4(p) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^4 (p + p^2) + O(p^3), \quad (1.51)$$

що дає хороше наближення для  $p$  у аналітичному вигляді

$$p \approx -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2\nu|A|^2(U_0 + \nu|A|^2)m^2b^4}{(\pi/2)^4\hbar^4n^4}}. \quad (1.52)$$

У другому випадку маємо:

$$p(1-p)K^4(p) = -\nu|A|^2(U_0 + \nu|A|^2)\frac{2m^2b^4}{\hbar^2n^4}, \quad (1.53)$$

звідки, враховуючи, що при малих  $p$  справедливе наближення

$$p(1-p)K^4(p) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^4 p + O(p^3), \quad (1.54)$$

отримуємо

$$p \approx -\frac{2\nu|A|^2(U_0 + \nu|A|^2)m^2b^4}{(\pi/2)^4\hbar^4n^4}. \quad (1.55)$$

Значення  $p$ , отримані за формулою (1.52) справедливі для будь-якого значення величини міжелектронної взаємодії, а отримані за формулою (1.55) лише при умові, що  $0 \leq \nu \leq |U_0|/|A|^2$ .

За результатами розрахунків авторами було досліджено властивості коефіцієнта прозорості  $D(E)$  в залежності від енергії падаючих на структуру частинок при різних значеннях величини електрон-електронної взаємодії ( $\nu$ ). У результаті аналізу було зроблено такі висновки.

Зі збільшенням величини  $\nu$ :

- максимумами коефіцієнта прозорості зміщуються у шкалі енергії в сторону більших значень, тим більше, чим більша величина коефіцієнта  $\nu$ ;
- форма залежності коефіцієнта прозорості  $D(E)$  від енергії є квазілоренцевою і зі збільшенням коефіцієнта  $\nu$  стає клиноподібною;
- існує таке критичне значення коефіцієнта  $\nu = \nu_{кр}$ , що при подальшому збільшенні  $\nu$  виникають гістерезисні явища коефіцієнта прозорості  $D(E)$ .

Отже, проаналізувавши основні теоретичні роботи, що стосуються врахування електрон-електронної взаємодії при тунелюванні електронів крізь багаточарові РТС, а також роботи, в яких досліджувались проблеми суміжного теоретичного та математичного характеру, можна зробити такі висновки.

На основі розв'язання нелінійного рівняння Шредінгера у грубих  $\delta$ -бар'єрних моделях РТС з використанням кількох перших порядків теорії збурень, була розвинута теорія коефіцієнта прозорості двобар'єрної наносистеми відносно потоку взаємодіючих між собою електронів. Проаналізовано деякі особливості появи гістерезису вольт-амперної характеристики резонансно-тунельного діода на її основі.

У подальшому було виявлено, що при значній енергії взаємодії між електронами, при розв'язуванні нелінійного рівняння Шредінгера, перші порядки теорії збурень дають дуже грубі результати. Отже, при значній міжелектронній взаємодії або слід враховувати вищі порядки даної теорії збурень, або скористатись іншими математичними методами.

Виявилось, що математичні методи, розвинуті у теорії Бозе-Ейнштейнівського конденсату хоча і дозволяють з потрібною точністю апроксимувати розв'язки рівняння Шредінгера й чисельно дослідити властивості коефіцієнта прозорості, проте здебільшого ці результати є незастосовними до розгляду явища резонансного тунелювання електронів крізь багаточарові РТС. Основна причина такої ситуації полягає у складності чисельного розв'язання систем нелінійних рівнянь, які виникають при застосуванні її до реалістичної моделі прямокутних потенціальних ям і бар'єрів при різних ефективних масах електрона у різних середовищах.

Отже, головною, досі не розв'язаною проблемою врахування електрон-електронної взаємодії в РТС, є динамічна задача тунелювання взаємодіючих електронів крізь РТС, що описується повним нелінійним рівнянням Шредінгера (1.19), яке враховує довільні величини електрон-електронної взаємодії. Розв'язання даної задачі дало б змогу розвинути квантовомеханічну теорію активної провідності моноенергетичного пучка електронів з урахуванням впливу міжелектронної взаємодії. Отримана інформація мала б важливе значення для забезпечення оптимальної роботи квантових каскадних лазерів і квантових каскадних детекторів, в яких багат шарові плоскі РТС використовуються як їх активні елементи.

Вплив міжелектронної взаємодії на транспортні властивості ДБРТС у тому діапазоні енергії взаємодії, де ще не виникають гістерезисні явища у реалістичні моделі наносистеми, буде вивчатися далі.

Після створення ККЛ і ККД актуалізувалася проблема оптимізації роботи цих наноприладів, що неможливо виконати без глибокого розуміння фізичних процесів, які відбуваються при тунелюванні електронних потоків крізь відкриті РТС. Для цього потрібно вивчити, як впливає на тунелювання електронів не лише їх взаємодія з домішками, дислокаціями, між собою та іншими квазічастинками і квантованими полями, зокрема фононами, а й сам геометричний дизайн наносистеми.

Однією з актуальних і поки що послідовно не розв'язаною теоретичною задачею є вивчення впливу електрон-електронної взаємодії на динамічну провідність, яка виникає при когерентному тунелюванні електронів крізь плоскі двобар'єрні РТС. З літератури [35–41] добре відомо, що врахування міжчастинкової взаємодії, навіть у найпростішому наближенні Хартрі-Фока, приводить до значних математичних труднощів, пов'язаних з необхідністю розв'язування нелінійних рівнянь Шредінгера.

Метою цього розділу є розв'язування повного рівняння Шредінгера з нелінійним гамільтоніаном типу Гросса-Пітаєвського, яке описує тунелювання електронів крізь плоску ДБРТС за умови, що електрони взаємодіють між собою

лише всередині наносистеми у наближенні Хартрі-Фока. Отримана хвильова функція дозволить визначити не лише спектральні параметри КСС, але й отримати динамічну провідність ДБРТС.

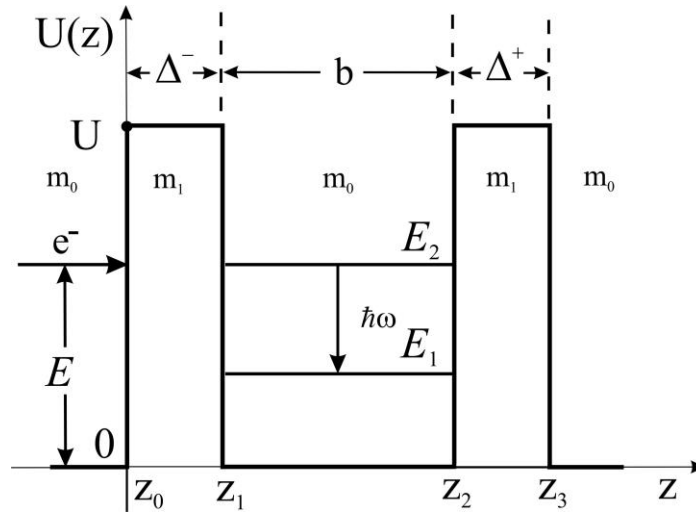
Варто відмітити, що розв'язки стаціонарних нелінійних рівнянь Шредінгера, які відомі з існуючої літератури [32–38] і частково описані у попередньому розділі, у силу математичної складності не вдається застосувати до динамічної задачі. Для цього необхідно знайти такий розв'язок стаціонарної нелінійної задачі, який міг би бути застосовним і для розв'язування динамічної задачі, що виникає при врахуванні взаємодії електронів з електромагнітним полем. Буде показано, що як і чисельний метод, так і пертурбаційний метод дозволяють розв'язати сформульовану задачу.

Отже, загальною метою цього розділу є побудова теорії коефіцієнта прозорості та активної динамічної провідності відкритої ДБРТС відносно пучка електронів, які взаємодіють між собою та з електромагнітним полем у моделі прямокутних потенціалів та різних ефективних мас у ямах і бар'єрах цієї наносистеми.

## **1.2. Гамільтоніан системи. Рівняння Шредінгера-Гросса-Пітаєвського**

Розглядається плоска відкрита несиметрична ДБРТС (рис. 1.1), що складається з двох шарів-бар'єрів однакового напівпровідникового матеріалу (наприклад  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ ) та шару-ями іншого матеріалу (наприклад  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ), що розташована у зовнішньому середовищі-ямі.

Геометричні розміри ДБРТС вважаються відомими: товщини вхідного ( $\Delta^-$ ) та вихідного ( $\Delta^+$ ) бар'єрів та ширина ( $b$ ) квантової ями. У подальшому наносистема буде розглядатися у декартовій системі координат з віссю  $OZ$ , що напрямлена перпендикулярно до її площин, з початком координат на межі між зовнішнім середовищем і поверхнею вхідного шару-бар'єру.



**Рис. 1.1.** Геометрична та енергетична схеми ДБРТС

Оскільки постійні решіток контактуючих між собою матеріалів  $a_0$  і  $a_1$  є близькими між собою за величиною (тобто  $|a_1 - a_0|/a_1 \leq 0.1\%$ ), то можна вважати, що межі поділу між внутрішніми шарами ДБРТС із зовнішнім середовищем є достатньо чіткими, а тому в подальшому цю наносистему можна розглядати в моделі прямокутних потенціальних ям та бар'єрів з різними ефективними масами електрона у них ( $m_0, m_1$ ).

Ввівши зручні позначення координат меж середовищ ДБРТС (рис. 1.1)

$$z_0 = 0; \quad z_1 = \Delta^-; \quad z_2 = b + \Delta^-; \quad z_3 = b + \Delta^- + \Delta^+. \quad (1.1)$$

запишемо відому ефективну масу електрона в ДБРТС

$$m(z) = m_0 \sum_{i=0}^2 (\theta(z - z_{2i-1}) - \theta(z - z_{2i})) + m_1 \sum_{i=0}^1 [\theta(z - z_{2i}) - \theta(z - z_{2i+1})], \quad (1.2)$$

та його потенціальну енергію

$$U(z) = U \sum_{i=0}^1 [\theta(z - z_{2i}) - \theta(z - z_{2i+1})], \quad (1.3)$$

де

$$\theta(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ 1, & z \geq 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

одинична функція Хевісайда,  $z_{-1} = -\infty$ ,  $z_4 = \infty$ .

Будемо вважати, що моноенергетичні електрони з енергією  $E$ , густиною струму  $j_0^+ \sim \sqrt{E}$  і концентрацією  $n_0$ , рухаючись перпендикулярно до площин ДБРТС, не взаємодіють між собою доти, поки не потрапляють на неї, для визначеності, зліва. За таких умов рух електронів можна розглядати як одновимірний.

Для дослідження спектральних характеристик КСС електрона необхідно спочатку розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера для хвильової функції  $\Psi(E, z)$

$$H(E, z)\Psi(E, z) = E \Psi(E, z), \quad (1.5)$$

де

$$H(E, z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_{e3}(z) \quad (1.6)$$

- гамільтоніан електрона квазістаціонарної задачі.

Енергія міжелектронної взаємодії  $U_{e3}(z)$  знаходиться методом самоузгодженого потенціалу Хартрі-Фока. У цьому разі  $U_{e3}(z)$  можна записати у вигляді:

$$U_{e3}(z) = \int V_{e3}(z - z') |\Psi(E, z')|^2 dz'. \quad (1.7)$$

Вважаючи електрон-електронну взаємодію за даних умов локальною

$$V_{\epsilon z}(z - z') = \nu \delta(z - z'), \quad (1.8)$$

отримується відомий [65] вираз

$$U_{\epsilon z}(z) = \nu |\Psi(E, z)|^2. \quad (1.9)$$

Тепер рівняння Шредінгера (1.5), з урахуванням (1.6) і (1.9), набуває вигляду, відомого як рівняння Гросса-Пітаєвського

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + \nu |\Psi(E, z)|^2 [\theta(z) - \theta(z - b)] \right] \Psi(E, z) = E \Psi(E, z), \quad (1.10)$$

де  $\nu$  – потенціал міжелектронної взаємодії, який вважається параметром задачі.

З урахуванням явного вигляду  $U(z)$  та наявності міжелектронної взаємодії лише у межах ДБРТС для знаходження хвильової функції  $\Psi(E, z)$  стаціонарної задачі, отримується система рівнянь Шредінгера:

$$\begin{cases} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - E \right) \Psi(E, z) = 0, & -\infty \leq z < 0, \quad z_3 < z \leq +\infty, \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E + \nu |\Psi(E, z)|^2 \right) \Psi(E, z) = 0, & 0 \leq z \leq z_1, \quad z_2 \leq z \leq z_3 \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - E + \nu |\Psi(E, z)|^2 \right) \Psi(E, z) = 0, & z_1 \leq z \leq z_2. \end{cases} \quad (1.11)$$

Розв'язки рівнянь (1.11) повинні задовольняти умови неперервності хвильової функції та густини її потоку на усіх межах системи ( $\eta \rightarrow +0$ ):

$$\left. \begin{aligned} \Psi(E, z) \Big|_{z=z_p-\eta} &= \Psi(E, z) \Big|_{z=z_p+\eta} \\ \frac{1}{m(z)} \frac{\partial \Psi(E, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_p-\eta} &= \frac{1}{m(z)} \frac{\partial \Psi(E, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_p+\eta} \end{aligned} \right\} (p = 0, 1, 2, 3) \quad (1.12)$$

а оскільки ДБРТС відкрита, то повинна виконуватися умова нормування:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(k', z) \Psi(k, z) dz = \delta(k - k'). \quad (k = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 E}). \quad (1.13)$$

Система рівнянь (1.11–1.13) визначає хвильову функцію  $\Psi(E, z)$ , що дає можливість отримати спектр резонансних енергій та ширин електронних КСС, а крім цього є базою для розв'язання повного рівняння Шредінгера, яке дозволить знайти динамічну провідність ДБРТС.

### 1.3. Пертурбаційний метод розв'язування нелінійного рівняння Гросса-Пітаєвського. Коефіцієнт прозорості ДБРТС

Пертурбаційний метод розв'язування нелінійного рівняння Гросса-Пітаєвського здійснюється так. Спочатку розв'язується лінійне стаціонарне рівняння Шредінгера (без електрон-електронної взаємодії). Записана для кожного шару ДБРТС і оточуючого середовища система рівнянь Шредінгера має вигляд:

$$\left\{ \begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - E \right) \Psi_0(E, z) &= 0, & -\infty \leq z < 0, \quad z_1 \leq z \leq z_2, \quad z_3 < z \leq +\infty, \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E \right) \Psi_0(E, z) &= 0, & 0 \leq z \leq z_1, \quad z_2 \leq z \leq z_3. \end{aligned} \right. \quad (1.14)$$

Розв'язки системи рівнянь (1.14) при  $E < U$  доцільно шукати у вигляді:



$$\begin{aligned}\Psi_0(E, z) = & \sum_{p=1}^3 (A_p(E)e^{ik_p z} + B_p(E)e^{-ik_p z}) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \\ & + (A_0(E)e^{ik_0 z} + B_0(E)e^{-ik_0 z}) \theta(-z) + A_4(E)e^{ik_4 z} \theta(z - z_3),\end{aligned}\quad (1.15)$$

де величини  $k_p$  визначаються динамічними характеристиками електрона:

$$k_0 = k_2 = k_4 = k = \frac{\sqrt{2m_0 E}}{\hbar}; \quad k_1 = k_3 = \frac{\sqrt{2m_1(E - U)}}{\hbar}. \quad (1.16)$$

З використанням граничних умов (1.12) коефіцієнти  $A_p(E)$ ,  $B_p(E)$ ,  $B_0(E)$ ,  $A_4(E)$  можуть бути однозначно виражені через коефіцієнт, який безпосередньо пов'язаний з густиною початкового потоку електронів, що потрапляють на ДБРТС, співвідношенням

$$j_0^+ = en_0 \sqrt{2Em_0^{-1}} |A_0(E)|^2, \quad (1.17)$$

де  $n_0$  – концентрація електронів у цьому потоці, а  $e$  – заряд електрона.

Знайдена у вигляді (1.15) функція  $\Psi_0(E, z)$  не дає безпосередньої можливості розв'язати рівняння Шредінгера (1.10), однак відому тепер функцію  $|\Psi_0(E, z)|^2$  завжди можна подати у вигляді суми  $N$  кусково-неперервних функцій:

$$|\Psi_0(E, z)|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{p=0}^N |\Psi_0(E, z_{2p})|^2 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p+1})], \quad (1.18)$$

де

$$z_p = \frac{p}{2N} b; \quad z_{-1} = z_0 = 0; \quad z_{2N} = z_{2N+1} = b + \Delta^- + \Delta^+. \quad (1.19)$$

Отже, з (1.18) тепер видно, що при достатньо великих значеннях  $N \gg 1$  неперервну функцію  $|\Psi_0(E, z)|^2$  з потрібною точністю завжди можна замінити на кусково-неперервну функцію  $|\tilde{\Psi}_0(E, z)|^2 \approx |\Psi_{0N}(E, z)|^2$ . Внаслідок цього нелінійний потенціал  $v|\Psi_0(E, z)|^2$  у рівнянні (1.10) переходить у кусково-лінійний потенціал  $v|\tilde{\Psi}_0(E, z)|^2$ , з яким при виконанні умов неперервності типу (1.12) у кожній точці  $z_{2p-1}$  апроксимоване нелінійне рівняння Гросса-Пітаєвського (2.10) уже розв'язується і нелінійна функція  $\Psi_I(E, z)$  знаходиться вже у першому наближенні.

За відомою тепер функцією  $\Psi_I(E, z)$  знову знаходиться функція  $|\Psi_I(E, z)|^2$ , яка подається у вигляді кусково-неперервної функції (при  $N \gg 1$ ):

$$|\tilde{\Psi}_I(E, z)|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{p=0}^N |\Psi_I(E, z_{2p})|^2 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p+1})]. \quad (1.20)$$

Підставлена в рівняння Шредінгера (1.10), разом з граничними умовами типу (1.12) у всіх точках  $z_{2p-1}$ , функція  $|\tilde{\Psi}_I(E, z)|^2$  лінеаризує потенціал у всіх інтервалах змінної  $z$ , що знову дозволяє розв'язати рівняння Гросса-Пітаєвського і знайти хвильову функцію  $\Psi_{II}(E, z)$  вже у другому циклі (наближенні).

Таким пертурбаційним способом знаходиться хвильова функція  $\Psi(E, z)$ , як розв'язок нелінійного рівняння Гросса-Пітаєвського (1.10) у довільному S-му циклі:

$$\Psi(E, z) = \lim_{S \rightarrow \infty} \Psi_S(E, z). \quad (1.21)$$

Кількість (S) циклів, які потрібно виконати при рекурсивному розрахунку  $\Psi(E, z)$  зумовлена необхідною точністю, яка контролюється умовою, щоб різниця між:  $|\Psi_{s-1}(E, z)|^2$  і  $|\Psi_s(E, z)|^2$  була як можна меншою, тобто:

$$\zeta = \max_{E, z} \left\{ \frac{|\Psi_s(E, z)|^2 - |\Psi_{s-1}(E, z)|^2}{|\Psi_s(E, z)|^2} \right\} \ll 1. \quad (1.22)$$

При цьому очевидно, що задана точність ( $\zeta$ ) розрахунку  $\Psi(E, z)$  залежить від величини потенціалу міжелектронної взаємодії  $\nu$ : чим він більший, тим більшу кількість циклів (S) потрібно здійснити для знаходження  $\Psi(E, z)$  з однією і тією ж точністю.

Остаточно хвильова функція  $\Psi(E, z)$ , яка описує міжелектронну взаємодію і електронні КСС в ДБРТС у пертурбаційному підході, набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \Psi(E, z) = & \sum_{p=1}^N (A_p^{(S)}(E) e^{ik_p^{(S)} z} + B_p^{(S)}(E) e^{-ik_p^{(S)} z}) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \\ & + (A_0^{(S)}(E) e^{ik_0 z} + B_0^{(S)}(E) e^{-ik_0 z}) \theta(-z) + A_{N+1}^{(S)}(E) e^{ik_{N+1} z} \theta(z - z_3), \end{aligned} \quad (1.23)$$

де

$$k_{N+1} = k_0; \quad k_p^{(S)} = \begin{cases} \frac{\sqrt{2m_1(E - U - \nu |\Psi_s(E, z_{2p})|^2)}}{\hbar}, & 0 \leq z \leq z_1, z_2 \leq z \leq z_3 \\ \frac{\sqrt{2m_0(E - \nu |\Psi_s(E, z_{2p})|^2)}}{\hbar}, & z_1 \leq z \leq z_2 \end{cases} \quad (1.24)$$

де  $p = 1, 2, \dots, N$ .

Нелінійне рівняння Гросса-Пітаєвського (1.10) також розв'язувалося і числовим методом для надійної впевненості в результатах обчислень коефіцієнта прозорості, спектральних параметрів електрона та активної динамічної провідності на основі розрахунку хвильових функцій  $\Psi(E, z)$  пертурбаційним методом.

Для чисельного розв'язування нелінійного рівняння Гросса-Пітаєвського (1.10) застосовувався метод скінченних різниць. З цією метою це рівняння (1.10) замінюється рівнянням у скінченних різницях на вибраній одновимірній дискретній сітці зі скінченним постійним кроком  $h$  по координаті.

$$h = \frac{z_3}{N_z - 1}, \quad (1.25)$$

де  $N_z$  – задана кількість координатних вузлів в цій сітці.

Другу похідну у рівнянні (1.10) можна записати як:

$$\frac{\partial^2 \Psi(E, z)}{\partial z^2} = \frac{\Psi(E, a_{j-1}) - 2\Psi(E, a_j) + \Psi(E, a_{j+1}))}{h^2}, \quad (1.26)$$

де номер вузла сітки  $j$  міститься в інтервалі  $[0, N_z - 1]$ , а  $a_j$  міститься в інтервалі  $(0, z_3)$ , причому  $h = a_{j+1} - a_j$ .

Тоді для певного скінченного фіксованого шару, що має номер  $j$ , рівняння Гросса-Пітаєвського (1.10) з граничними умовами (1.12) зводиться до рівняння у скінченних різницях:

$$\Psi(E, a_j)(2 + K_j^2 h^2) - \Psi(E, a_{j-1}) - \Psi(E, a_{j+1}) + K_e^2 h^2 |\Psi(E, a_j)|^2 \Psi(E, a_j) = 0, \quad (1.27)$$

а умови неперервності хвильової функції та густини її потоку на межах наносистеми дають ще вісім рівнянь, записаних для фіксованих вузлів сітки

$$\begin{cases} \Psi(E, z_i - h) - \Psi(E, z_i + h) = 0; \\ \left(1 + \frac{m_i}{m_{i+1}}\right) \Psi(E, z_i) - \frac{m_i}{m_{i+1}} \Psi(E, z_i + h) - \Psi(E, z_i - h) = 0, \end{cases} \quad (i = 0, 1, 2, 3), \quad (1.28)$$

де  $m_0 = m_2 = m_4$ ;  $m_1 = m_3$ .

У рівнянні (1.27) введені величини

$$K_e^j = \sqrt{\frac{2m_j v}{\hbar^2}}; \quad K_j = \sqrt{\frac{2m_j (U(a_j) - E)}{\hbar^2}} = \begin{cases} i \sqrt{\frac{2m_j E}{\hbar^2}}, & z_1 < a_j \leq z_2 \\ \sqrt{\frac{2m_j (U(a_j) - E)}{\hbar^2}}, & 0 \leq a_j \leq z_1, z_2 \leq a_j \leq z_3 \end{cases} \quad (1.29)$$

Наявність у рівнянні (1.27) доданка  $K_e^2 h^2 |\Psi(E, a_j)|^2$  робить задачу нелінійною. Проте, знаючи розв'язок стаціонарної задачі (1.15)  $\Psi_0(E, z)$ , відомі значення  $\Psi_0(E, a_j)$ , що відповідають вузлам сітки згідно з системою (1.28), підставляються в нелінійний доданок, що міститься у рівнянні (1.27). Це дозволяє зафіксувати значення потенціалу міжелектронної взаємодії в першому та останньому вузлах сітки, та для вузлів сітки, які відповідають межах наносистеми. Після такої операції розв'язок рівняння у скінченних різницях (1.27) шукається методом прогонки. Точність розрахунку суттєво залежить від кроку сітки по координаті ( $h$ ). При цьому щільність кроків сітки пов'язана з вкладом від доданків, які характеризують потенціал міжелектронної взаємодії ( $v |\Psi(E, a_j)|^2$ ), що суттєво впливає на збіжність різницевої схеми. Зрозуміло, що при достатньо великих значеннях  $v$  крок сітки по координаті ( $h$ ) має бути дуже щільним, що може спричиняти суттєве збільшення машинного часу, потрібного для розрахунку хвильових функцій. У такому випадку перевагу в розрахунках має розвинутий у попередньому параграфі пертурбаційний метод.

Знайдені пертурбаційним та чисельним методами хвильові функції як розв'язки нелінійного рівняння Гросса-Пітаєвського (1.10) згідно з квантовою механікою, дозволяють отримати коефіцієнт прозорості відкритої ДБРТС:

$$D(E) = |A_0^{(s)}(E)|^{-2} \cdot \text{Im} \left\{ \Psi(E, z) \frac{\partial \Psi(E, z)}{k \partial z} \right\}_{z=z_3+\eta} \quad (1.30)$$

відносно потоку тунелюючих крізь неї взаємодіючих між собою електронів.

Як відомо [10], за коефіцієнтом прозорості  $D(E)$  знаходяться спектральні параметри (резонансні енергії та резонансні ширини) квазістаціонарних станів електронів. Положення максимумів  $D(E)$  у шкалі енергій визначають резонансні енергії ( $E_n$ ), а їх ширини на половині висоти визначають резонансні ширини ( $\Gamma_n$ )  $n$ -их КСС.

#### 1.4. Теорія активної динамічної провідності плоских наноструктур

Для побудови теорії активної динамічної провідності наноструктур з врахуванням електрон-електронної взаємодії потрібно розв'язати повне нелінійне рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(E, z, t)}{\partial t} = [H(E, z) + H(z, t)] \Psi(E, z, t), \quad (1.31)$$

де

$$H(E, z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + v |\Psi(E, z)|^2 [\theta(z) - \theta(z-b)] \quad (1.32)$$

– основний, у розумінні теорії збурень, гамільтоніан квазістаціонарної задачі,

$$H(z,t) = -2e\epsilon\{z[\theta(z) - \theta(z - z_3)] + z_3\theta(z - z_3)\} \cos \omega t \quad (1.33)$$

– гамільтоніан, який описує взаємодію електрона зі змінним у часі електромагнітним полем частоти  $\omega$  й амплітудою електричної складової  $\epsilon$ .

Напруженість ( $\epsilon$ ) електричного поля вважається малою, що дозволяє розглядати гамільтоніан  $H(z,t)$  малим у розумінні теорії збурень.

Рівняння (1.31) не має точного розв'язку, але з урахуванням малості  $H(z,t)$  у розумінні теорії збурень, його можна розв'язувати у так званому наближенні слабого сигналу [10], коли хвильову функцію  $\Psi(E,z,t)$  можна шукати у вигляді:

$$\Psi(E,z,t) = \Psi(E,z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_1(E,z,t), \quad (\omega_0 = \frac{E}{\hbar}) \quad (1.34)$$

де хвильова функція  $\Psi(E,z)$  є розв'язком квазістаціонарного нелінійного рівняння Шредінгера (1.10).

Подаючи невідому функцію  $\Psi_1(E,z,t)$  у вигляді розкладу за всіма можливими гармоніками

$$\Psi_1(E,z,t) = \sum_{n=1}^{\infty} (\Psi_{+n}(E,z)e^{-i(\omega_0+n\omega)t} + \Psi_{-n}(E,z)e^{-i(\omega_0-n\omega)t}), \quad (1.35)$$

у силу малості напруженості електричного поля  $\epsilon$ , далі можна обмежитись одномодовим наближенням. Тоді хвильова функція  $\Psi_1(E,z,t)$  у цьому наближенні слабого сигналу [11] отримується з урахуванням першої гармоніки за польовою частотою:

$$\Psi_1(E,z,t) = \Psi_{+1}(E,z)e^{-i(\omega_0+\omega)t} + \Psi_{-1}(E,z)e^{-i(\omega_0-\omega)t}. \quad (1.36)$$

Для знаходження невідомої функції  $\Psi_1(E, z, t)$  (2.34) вона підставляється в (1.31) і з урахуванням (1.6) отримується

$$\begin{aligned} E\Psi(E, z) + \hbar(\omega_0 + \omega)\Psi_{+1}(E, z)e^{-i\omega t} + \hbar(\omega_0 - \omega)\Psi_{-1}(E, z)e^{i\omega t} = \\ = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + \nu |\Psi(E, z)|^2 [\theta(z) - \theta(z-b)] - eC(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \right\} \times \\ \times [z[\theta(z) - \theta(z-z_3)] + z_3\theta(z-z_3)] [\Psi(E, z) + \Psi_{+1}(E, z)e^{-i\omega t} + \Psi_{-1}(E, z)e^{i\omega t}] \end{aligned} \quad (1.37)$$

Зберігаючи у лівій та правій частинах рівняння (1.36) величини першого порядку малості та прирівнюючи коефіцієнти при  $e^{i\omega t}$  та  $e^{-i\omega t}$ , отримуються рівняння для визначення обох складових  $\Psi_{\pm 1}(E, z)$

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + \nu |\Psi(E, z)|^2 [\theta(z) - \theta(z-b)] - \hbar(\omega_0 \pm \omega) \right) \Psi_{\pm 1}(E, z) = \\ = eC[z[\theta(z) - \theta(z-z_3)] + z_3\theta(z-z_3)] \Psi(E, z). \end{aligned} \quad (1.38)$$

Знайдена в попередньому параграфі пертурбаційним методом функція  $\Psi(E, z)$ , у вигляді (1.23), дозволяє тепер шукати розв'язки неоднорідних диференціальних рівнянь у вигляді:

$$\Psi_{\pm 1}(E, z) = \Psi_{\pm}(E, z) + \Phi_{\pm}(E, z), \quad (1.39)$$

де  $\Psi_{\pm}(E, z)$  – розв'язки однорідних,  $\Phi_{\pm}(E, z)$  – часткові точні розв'язки неоднорідних рівнянь (1.38).

Розв'язки однорідних рівнянь

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + \nu |\Psi(E, z)|^2 - \hbar(\omega_0 \pm \omega) \right) \Psi_{\pm 1}(E, z) = 0 \quad (1.40)$$

будемо шукати у вигляді:



$$\begin{aligned}
\Psi_{\pm}(E, z) &= \Psi_{\pm}^{(0)}(E, z)\theta(-z) + \Psi_{\pm}^{(N+1)}(E, z)\theta(z - z_3) + \sum_{p=1}^N \Psi_{\pm}^{(p)}(E, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\
&= B_{\pm}^{(0)}(E) e^{-ik_{\pm}^{(0)}z} \theta(-z) + A_{\pm}^{(N+1)}(E) e^{ik_{\pm}^{(N+1)}z} + \sum_{p=1}^N \left[ B_{\pm}^{(p)}(E) e^{-ik_{\pm}^{(p)}z} + A_{\pm}^{(p)}(E) e^{ik_{\pm}^{(p)}z} \right]
\end{aligned} \tag{1.41}$$

де

$$\begin{aligned}
k_{\pm}^{(0)} &= k_{\pm}^{(N+1)} = \frac{\sqrt{2m_0(E \pm \hbar\omega)}}{\hbar}; \\
k_{\pm}^{(p)} &= \begin{cases} \frac{\sqrt{2m_1(E - U - v|\Psi_s(E, z_{2p})|^2) \pm \hbar\omega}}{\hbar}, & 0 \leq z \leq z_1, z_2 \leq z \leq z_3 \\ \frac{\sqrt{2m_0(E - v|\Psi_s(E, z_{2p})|^2) \pm \hbar\omega}}{\hbar}, & z_1 \leq z \leq z_2 \end{cases}
\end{aligned} \tag{1.42}$$

Точні частинні розв'язки рівнянь (1.38) мають вигляд:

$$\begin{aligned}
\Phi_{\pm}(E, z) &= \sum_{p=1}^N \Phi_{\pm}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Phi_{\pm}^{(N+1)}(z_3) \theta(z - z_3) = \\
&= \sum_{p=1}^N \left[ \mp \frac{e\epsilon}{\hbar\omega} z \Psi^{(p)}(E, z) + \frac{e\epsilon}{m_p \omega^2} \frac{d\Psi^{(p)}(E, z)}{dz} \right] \times \\
&\times [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \mp \frac{e\epsilon}{\hbar\omega} z_3 \Psi^{(N+1)}(E, z_3) \theta(z - z_3).
\end{aligned} \tag{1.43}$$

Отже, тепер загальні розв'язки рівнянь (1.38) можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned}
\Psi_{\pm 1}(E, z) &= \Psi_{\pm 1}^{(0)}(E, z)\theta(-z) + \Psi_{\pm 1}^{(N+1)}(E, z)\theta(z - z_3) + \sum_{p=1}^N \Psi_{\pm 1}^{(p)}(E, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\
&= \Psi_{\pm}^{(0)}(E, z)\theta(-z) + (\Psi_{\pm}^{(N+1)}(E, z) + \Phi_{\pm}^{(N+1)}(E, z))\theta(z - z_3) + \\
&+ \sum_{p=1}^N (\Psi_{\pm}^{(p)}(E, z) + \Phi_{\pm}^{(p)}(E, z)) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] =
\end{aligned} \tag{1.44}$$

$$\begin{aligned}
&= B_{\pm}^{(0)}(E)e^{-ik_{\pm}^{(0)}z}\theta(-z) + \left( A_{\pm}^{(N+1)}e^{ik_{\pm}^{(N+1)}z} \mp \frac{e\epsilon}{\hbar\omega} z_3 \Psi^{(N+1)}(E, z_3) \right) \theta(z - z_3) + \\
&+ \sum_{p=1}^N \left( B_{\pm}^{(p)}(E)e^{-ik_{\pm}^{(p)}z} + A_{\pm}^{(p)}(E)e^{ik_{\pm}^{(p)}z} \mp \frac{e\epsilon}{\hbar\omega} z \Psi^{(p)}(E, z) + \frac{e\epsilon}{m_p \omega^2} \frac{d\Psi^{(p)}(E, z)}{dz} \right) \times \\
&\quad \times [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)]
\end{aligned}$$

Отримані повні хвильові функції (1.34) та відповідні їм потоки ймовірностей повинні також задовольняти умови неперервності на всіх гетеромежах наносистеми в довільний момент часу  $t$

$$\left\{ \begin{aligned} &\Psi^{(p)}(E, z_p, t) = \Psi^{(p+1)}(E, z_p, t); \\ &\left. \frac{1}{m_p} \frac{d\Psi^{(p)}(E, z, t)}{dz} \right|_{z=z_p} = \left. \frac{1}{m_{p+1}} \frac{d\Psi^{(p+1)}(E, z, t)}{dz} \right|_{z=z_p} \end{aligned} \right. \quad (p = 0, 1, 2, \dots, N) \quad (1.45)$$

Перепишемо тепер граничні умови (1.45) з використанням зображення хвильової функції  $\Psi(E, z, t)$  у одномодовому наближенні (1.36)

$$\left. \begin{aligned} &\Psi^{(p)}(E, z_p)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{+1}^{(p)}(E, z_p)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Psi_{-1}^{(p)}(E, z_p)e^{-i(\omega_0 - \omega)t} = \\ &= \Psi^{(p+1)}(E, z_p)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{+1}^{(p+1)}(E, z_p)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Psi_{-1}^{(p+1)}(E, z_p)e^{-i(\omega_0 - \omega)t}; \\ &\frac{1}{m_p} \left[ \Psi^{(p)}(E, z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{+1}^{(p)}(E, z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Psi_{-1}^{(p)}(E, z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t} \right] \Big|_{z=z_p} = \\ &\frac{1}{m_{p+1}} \left[ \Psi^{(p+1)}(E, z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{+1}^{(p+1)}(E, z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Psi_{-1}^{(p+1)}(E, z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t} \right] \Big|_{z=z_p} \end{aligned} \right\} \quad (1.46)$$

Прирівнюючи коефіцієнти при  $e^{i\omega t}$  та  $e^{-i\omega t}$  у доданках першого порядку малості, отримується наступна система з  $2N + 2$  лінійних неоднорідних рівнянь:

$$\begin{aligned}
& A_{\pm}^{(p)}(E)e^{ik_{\pm}^{(p)}z_p} + B_{\pm}^{(p)}(E)e^{-ik_{\pm}^{(p)}z_p} - A_{\pm}^{(p+1)}(E)e^{ik_{\pm}^{(p+1)}z_p} - B_{\pm}^{(p+1)}(E)e^{-ik_{\pm}^{(p+1)}z_p} = 0; \\
& \frac{ik_{\pm}^{(p)}}{m_p} \left[ A_{\pm}^{(p)}(E)e^{ik_{\pm}^{(p)}z_p} - B_{\pm}^{(p)}(E)e^{-ik_{\pm}^{(p)}z_p} \right] - \frac{ik_{\pm}^{(p+1)}}{m_{p+1}} \left[ A_{\pm}^{(p+1)}(E)e^{ik_{\pm}^{(p+1)}z_p} - B_{\pm}^{(p+1)}(E)e^{-ik_{\pm}^{(p+1)}z_p} \right] = \\
& = \mp \frac{e\mathcal{E}}{\hbar\omega} \left[ \frac{1}{m_{p+1}} - \frac{1}{m_p} \right] \Psi^{(p+1)}(E, z_p) + \frac{e\mathcal{E}}{\omega^2} \left[ \left( \frac{k_{p+1}}{m_{p+1}} \right)^2 - \left( \frac{k_p}{m_p} \right)^2 \right] \Psi^{(p)}(E, z_p), \\
& (p = 0, 1, 2, \dots, N)
\end{aligned} \tag{1.47}$$

з якої визначаються всі коефіцієнти:  $B_{\pm}^{(0)}(E)$ ,  $A_{\pm}^{(N+1)}(E)$ ,  $B_{\pm}^{(p)}(E)$ ,  $A_{\pm}^{(p)}(E)$  ( $p = 1 \div N$ ).

Тепер однозначно визначені функції  $\Psi_{\pm}(E, z)$ , поправка першого порядку  $\Psi_1(E, z, t)$ , а отже, відома і повна хвильова функція  $\Psi(E, z, t)$ .

У подальшому будемо вважати, що розміри  $(\Delta^- + \Delta^+ + b)$  досліджуваної ДБРТС є малими порівняно з довжиною хвилі електромагнітного поля з яким взаємодіють електрони.

У такому випадку можна знехтувати залежністю напруженості  $\mathcal{E}$  електричної складової електромагнітного поля від координати  $z$  у межах ДБРТС. Отже, знайдена повна хвильова функція електронів, взаємодіючих з періодичним у часі електромагнітним полем, згідно з квантовою механікою визначає густину електронного струму крізь наноструктуру:

$$J(E, z, t) = \frac{ie\hbar n_0}{2m(z)} \left[ \Psi(E, z, t) \frac{\partial}{\partial z} \Psi^*(E, z, t) - \Psi^*(E, z, t) \frac{\partial}{\partial z} \Psi(E, z, t) \right]. \tag{1.48}$$

Розрахуємо тепер енергію  $\varepsilon$ , яку може отримати чи передати електрон електромагнітному полю за період  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ . Згідно з електродинамікою вона рівна:

$$\varepsilon = \int_0^T dt \int_0^{z_3} J(E, z, t) \epsilon(z, t) dz = z_3 \int_0^T \epsilon(t) j(E, t) dt, \quad (1.49)$$

де

$$j(E, t) = \frac{1}{z_3} \int_0^{z_3} J(E, z, t) dz, \quad (z_3 = \Delta^- + \Delta^+ + b) \quad (1.50)$$

густина наведеного струму.

Оскільки фаза густини наведеного струму в загальному випадку зміщена по відношенню до фази електричної складової електромагнітного поля  $\epsilon(t)$  на величину  $\Delta\varphi$ , то вводиться комплексна динамічна провідність

$$\sigma = \text{Re } \sigma + i \text{Im } \sigma, \quad (1.51)$$

яка пов'язана з наведеним струмом

$$i(E, t) = \text{Re}(\sigma) \epsilon(t) = 2 \text{Re}(\sigma) \cos(\omega t). \quad (1.52)$$

Тепер з (2.49) з урахуванням (2.52) отримується

$$\mathcal{E} = 4 z_3 \epsilon^2 \text{Re}(\sigma) \int_0^T \cos^2(\omega t) dt = 2 z_3 \epsilon^2 T \text{Re}(\sigma). \quad (1.53)$$

З іншого боку, енергія ( $\mathcal{E}$ ) взаємодії електрона з електромагнітним полем тепер може бути обчислена як сума енергій електронних хвиль, які внаслідок існування струму в ДБРТС виходять з обох її сторін:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \frac{\hbar \omega T}{e} \{ & [J(E + \hbar \omega, z = z_3, t) - J(E - \hbar \omega, z = z_3, t)] - \\ & - [J(E + \hbar \omega, z = 0, t) - J(E - \hbar \omega, z = 0, t)] \}. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Тепер можна виконати розрахунок  $\mathcal{E}$ , знаходячи попередньо густини електронних потоків, що мають енергії  $\hbar(\omega \pm \omega_0)$ .

Використовуючи (1.48), а також явний вигляд функцій  $\Psi_{\pm 1}(E, z)$ , розраховуються густини електронних потоків справа від ДБРТС

$$J_{\pm}(E, \hbar\omega, b) = \frac{e\hbar}{2m_0} \left( 2k_{\pm} |A_{\pm}^{(N+1)}(E)|^2 + 2k |P_{\pm}(E)|^2 + (k + k_{\pm}) (P_{\pm}^*(E) A_{\pm}^{(N+1)}(E) + P_{\pm}(E) A_{\pm}^{(N+1)*}(E)) \right) \quad (1.55)$$

та зліва від неї

$$J_{\pm}(E, \hbar\omega, 0) = \frac{e\hbar}{m_0} k_{\pm} |B_{\pm}^{(0)}(E)|^2, \quad (1.56)$$

де

$$P_{\pm}(E) = \mp \frac{e\epsilon z_3}{\hbar\omega} A_{\pm}^{(N+1)}(E). \quad (1.57)$$

Враховуючи тепер, що другий та третій доданки у (1.55) будучи пропорційними  $\epsilon$  як малому параметру, дають набагато менший вклад у густину струму, ніж перший. Прирівнюючи між собою вирази (1.53) та (1.54), отримаємо кінцевий вираз для дійсної величини наведеної провідності ( $\sigma$ ) ДБРТС. Як функція від частоти ( $\omega$ ) електромагнітного поля та енергії ( $E$ ) пучка налітаючих на наносистему та взаємодіючих між собою всередині неї електронів з концентрацією  $n_0$ ,  $\sigma(E, \omega)$  визначає величину від'ємної чи позитивної активної динамічної провідності наносистеми:

$$\sigma(E, \omega) = \sigma^+(E, \omega) + \sigma^-(E, \omega). \quad (1.58)$$

Тут

$$\begin{aligned}\sigma^+(E, \omega) &= \frac{\hbar^2 \omega n_0}{2m_0 z_3 \epsilon^2} \left( k_+^{(0)} |B_+^{(0)}(E)|^2 - k_-^{(0)} |B_-^{(0)}(E)|^2 \right), \\ \sigma^-(E, \omega) &= \frac{\hbar^2 \omega n_0}{2m_0 z_3 \epsilon^2} \left( k_+^{(N+1)} |A_+^{(N+1)}(E)|^2 - k_-^{(N+1)} |A_-^{(N+1)}(E)|^2 \right),\end{aligned}\tag{1.59}$$

- парціальні складові динамічної провідності, що зумовлені потоками електронів, які виходять уперед ( $\sigma^+(E, \omega)$ ) і назад ( $\sigma^-(E, \omega)$ ) по відношенню до початкового напрямку потоку, який падає на ДБРТС.

Оскільки величини коефіцієнтів  $B_{\pm}^{(0)}(E)$ ,  $A_{\pm}^{(N+1)}(E)$ ,  $A_{\pm}^{(p)}(E)$ ,  $B_{\pm}^{(p)}(E)$  ( $p = 0 \div N$ ) згідно з (1.47) пропорційні величині амплітуди напруженості електричного поля  $\epsilon$ , то із залежностей (1.59) випливає, що величина активної динамічної провідності, розрахована в наближенні слабкого сигналу, як і повинно було бути, не залежить від амплітуди  $\epsilon$ .

Отже, у малосигнальному підході побудовано послідовну аналітичну теорію наведеної активної динамічної провідності двобар'єрної РТС відносно потоку взаємодіючих між собою і з електромагнітним полем електронів. Аналіз властивостей наведеної динамічної провідності ДБРТС з заданими фізичними та геометричними параметрами виконується у наступному параграфі.

## **1.5. Аналіз спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів двобар'єрною резонансно-тунельною структурою з урахуванням електрон-електронної взаємодії**

Вплив міжелектронної взаємодії на коефіцієнт прозорості, спектральні параметри і динамічну провідність відкритої ДБРТС будемо вивчати на прикладі часто експериментально досліджуваної плоскої наноструктури з  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ - ямами і  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  – бар'єрами з фізичними параметрами, що приведені у табл. 1.1

Таблиця. 1.1.

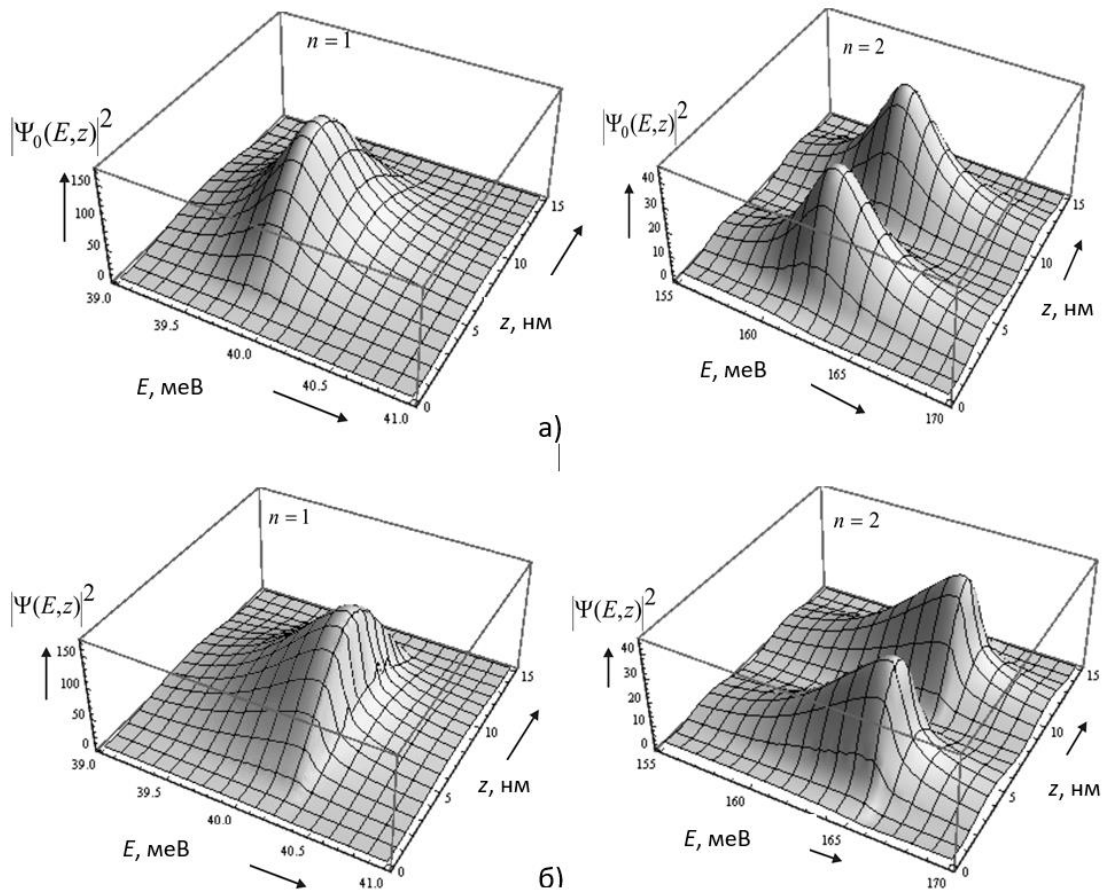
	$m_e$	$a$ , (нм)	Висота потенціального бар'єра	Концентрація електронів
$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	0,046	0,587	$U=516$ меВ	$n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$
$\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$	0,089	0,587		

Щоб з'ясувати характер змін коефіцієнта прозорості  $D(E, \nu)$  і активної провідності  $\sigma(E, \omega, \nu)$  у залежності від величини  $\nu$ , на рис. 1.2а, б приведено приклади залежностей  $|\Psi_0(E, z)|^2$  від координати ( $z$ ) і енергії ( $E$ ), розраховані в околах резонансних енергій двох перших квазістаціонарних станів ( $n=1;2$ ) при різних величинах енергії міжелектронної взаємодії ( $\nu$ ). З цього рисунка видно, що незалежно від величини  $\nu$  функція  $|\Psi(E, z)|^2$  при  $E = \text{const}$ , у околах  $n$ -го КСС, має  $n$  максимумів, як і у випадку закритої наносистеми. При фіксованому значенні координати величина  $|\Psi(E, z = \text{const})|^2$ , як функція від енергії, відхиляється від лоренцової форми і деформується так, що її високоенергетичне крило все крутіше опускається, а низькоенергетичне, поступово піднімаючись, стає більш пологим.

Виявлені властивості  $|\Psi(E, z)|^2$  зумовлюють еволюцію форми коефіцієнта прозорості  $D(E, \nu)$ , у залежності від енергії ( $E$ ) у околах першого і другого КСС при різних значеннях потенціалу ( $\nu$ ) міжелектронної взаємодії, що приведена на рис. 1.3. Для порівняння, на цьому ж рисунку приведено еволюцію  $D(E, \nu)$  зі зміною  $\nu$  у часто застосовній  $\delta$ -бар'єрній моделі для ДБРТС з тими ж параметрами.

З рис. 1.3 видно, що оскільки  $\delta$ -бар'єрна модель, по відношенню до моделі прямокутних потенціалів завищує величини резонансних енергій КСС електрона на десятки відсотків, а резонансні ширини – у десятки разів [101], так і міжелектронна взаємодія у більш реалістичній моделі приводить до суттєвої

деформації форми коефіцієнта прозорості вже при електрон-електронній взаємодії на два порядки меншій, ніж у  $\delta$ -бар'єрній моделі.



**Рис. 1.2.** Еволюція  $|\Psi(E, z)|^2$  двох перших КСС ( $n=1, 2$ ): а)  $\nu = 0$  ( $n=1, 2$ ); б)

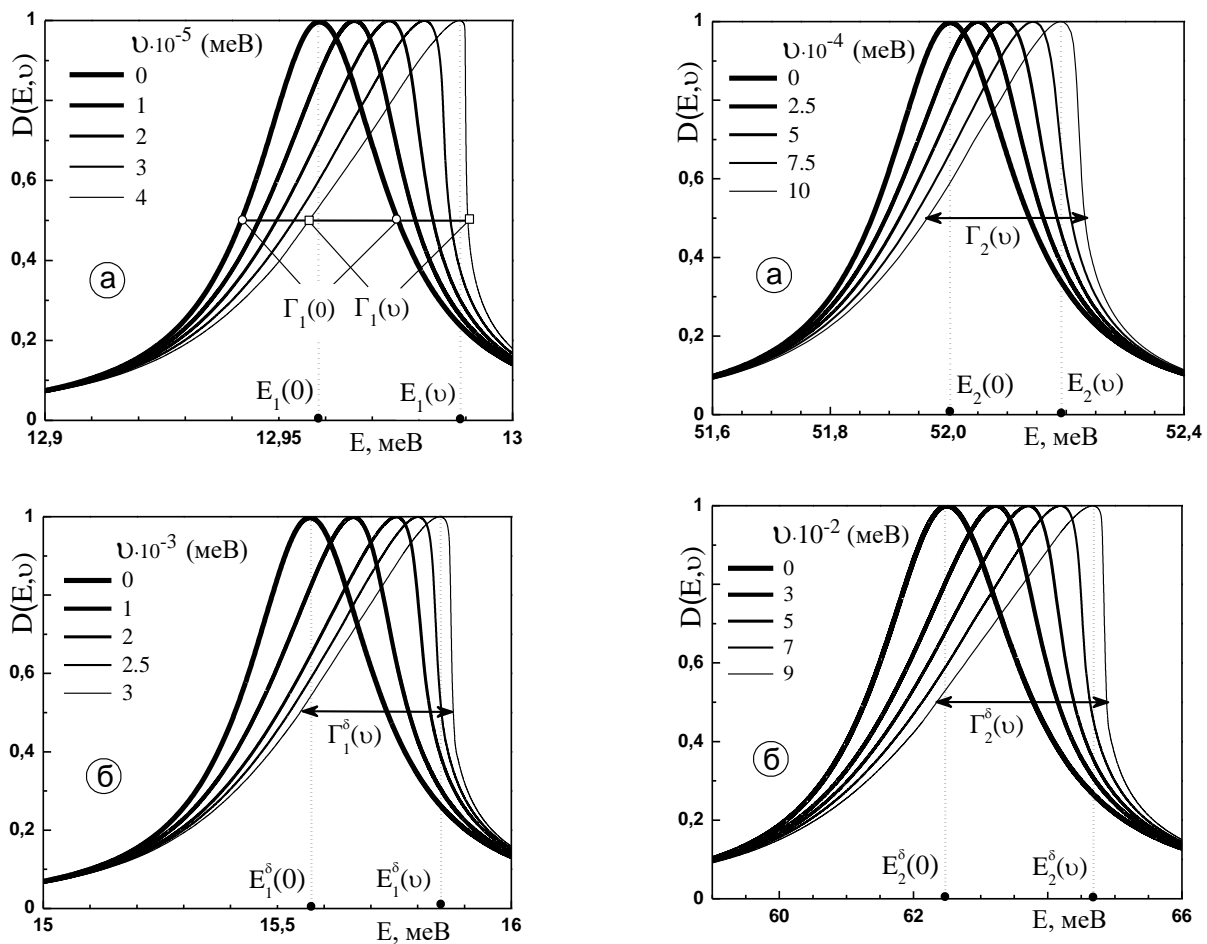
$\nu = 10^{-3}$  меВ ( $n=1$ ),  $\nu = 0,1$  меВ ( $n=2$ ) при параметрах ДБРТС

$$\Delta^- = \Delta^+ = 2,1 \text{ нм}, b = 10,8 \text{ нм}$$

З рис. 1.3 видно також, що при  $\nu = 0$  у обох моделях еволюція  $D(E, \nu)$  якісно однакова. Коефіцієнт прозорості  $D(E, \nu)$  у всіх КСС має форму кривої Лоренца з максимальним значенням  $D(E_n, \nu) = 1$  при всіх резонансних енергіях  $E_n(0)$  з півширинами  $\Gamma_n(0)$ . Зі збільшенням енергії електрон-електронної взаємодії форма коефіцієнта  $D(E, \nu)$  в околах перенормованих резонансних енергій ( $E_n(\nu)$ ) усіх КСС спочатку стає квазілоренцевою. З подальшим збільшенням  $\nu$  функція  $D(E, \nu)$  все більше деформується так, що її



низькоенергетичне крило в околі максимуму повільно піднімається, набуваючи квазілінійної залежності від  $E$ , а високоенергетичне крило різко, майже прямовисно опускається. Отже, при досить великих значеннях  $\nu$  (тим більших, чим більші номери КСС) форма  $D(E, \nu)$ , як видно з рис. 1.3, у околах перенормованих взаємодією резонансних енергій ( $E_n(\nu)$ ) різко відрізняється від лоренцової і стає клиноподібною. Внаслідок цього виникає потреба так узагальнити поняття резонансних енергій ( $E_n(\nu)$ ) і ширин ( $\Gamma_n(\nu)$ ) симетричної лоренцівської кривої, щоб вони були поширені на клиноподібну форму  $D(E, \nu)$ .



**Рис. 1.3.** Залежності коефіцієнта прозорості  $D$  від енергії  $E$  у околах двох перших КСС при різних значеннях енергії міжелектронної взаємодії  $\nu$  для ДБРТС з параметрами  $\Delta^- = \Delta^+ = 2,4$  нм,  $b = 21,6$  нм. а) Модель прямокутних потенціалів; б)  $\delta$ -бар'ерна модель

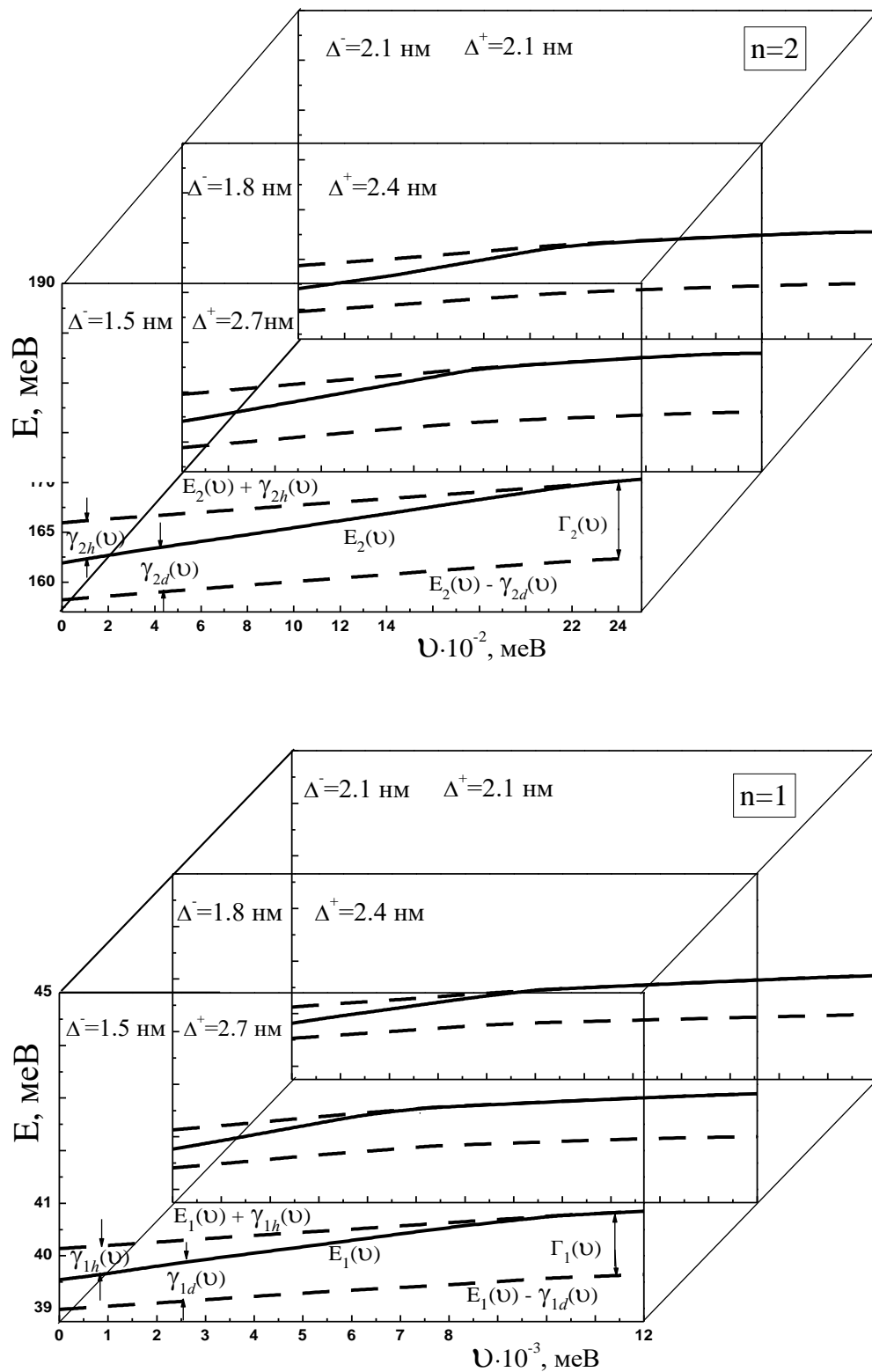
Спосіб реалізації узагальнення наочно видно з рис. 1.4. Справді, узагальнення резонансних енергій ( $E_n(\nu)$ ) очевидне, а узагальнені резонансні ширини ( $\Gamma_n(\nu)$ )  $n$ -го КСС доцільно увести як суму низько – ( $\gamma_{nd}(\nu)$ ) і високоенергетичних півширин ( $\gamma_{nh}(\nu)$ ), бо, оскільки,  $\gamma_{nd}(\nu \rightarrow 0) = \gamma_{nh}(\nu \rightarrow 0) = \Gamma(0)/2$ , то саме це забезпечує правильний граничний перехід  $\Gamma_n(\nu \rightarrow 0) = \Gamma_n$ .

Доцільність і зручність використання узагальнених резонансних енергій і ширин, як узагальнених спектральних параметрів коефіцієнта  $D(E, \nu)$ , ілюструє рис. 21.4 на якому показана залежність від величини міжелектронної взаємодії узагальненої резонансної енергії  $E_n(\nu)$ , а через відстань між лініями  $E_n(\nu) - \gamma_{nd}(\nu)$  і  $E_n(\nu) + \gamma_{nh}(\nu)$  і узагальненої резонансної ширини  $\Gamma_n(\nu)$ .

Оскільки на практиці часто доводиться мати справу з несиметричними структурами, то важливо дослідити поведінку узагальнених резонансних ширин та енергій у залежності від енергії міжелектронної взаємодії в ДБРТС з різними товщинами вхідного ( $\Delta^-$ ) та вихідного ( $\Delta^+$ ) бар'єрів. Для того, щоб мати змогу якісно та кількісно узагальнити результати дослідження, розглянемо несиметричну ДБРТС, товщини ( $\Delta^\pm$ ) обох бар'єрів якої задовільняють умову  $\Delta = \Delta^- + \Delta^+ = 4,2$  нм.

На рис. 1.4 показана залежність резонансних енергій та ширин перших двох КСС від енергії міжелектронної взаємодії ( $\nu$ ) при різних величинах  $\Delta^-$  і  $\Delta^+$ . Приведені залежності повністю пояснюють квазілоренцову форму залежності коефіцієнта прозорості  $D(E, \nu)$  від енергії  $E$ . З рис. 1.4 видно, що зі зменшенням товщини ( $\Delta^-$ ) вхідного бар'єра і збільшенням на таку ж саму величину товщини ( $\Delta^+$ ) вихідного бар'єра резонансні енергії та ширини зростають. Узагальнені резонансні ширини  $\gamma_{nd}(\nu)$  і  $\gamma_{nh}(\nu)$  при всіх співвідношеннях товщин бар'єрів, за малих значень  $\nu$ , спочатку майже рівні між собою ( $\gamma_{nd}(\nu) \approx \gamma_{nh}(\nu)$ ). Зі збільшенням енергії міжелектронної взаємодії  $\gamma_{nh}(\nu)$  зменшується, а  $\gamma_{nd}(\nu)$  збільшується, так що при деякому  $\nu_{кр}$ :  $\Gamma_n(\nu_{кр}) = \gamma_{nd}$

$(\nu_{кр}); \gamma_{nh}(\nu_{кр})=0$ . Зауважимо також, що при зміні величини енергії міжелектронної взаємодії резонансна ширина  $\Gamma_n(\nu) = \gamma_{nh}(\nu) + \gamma_{nd}(\nu) = const$ .

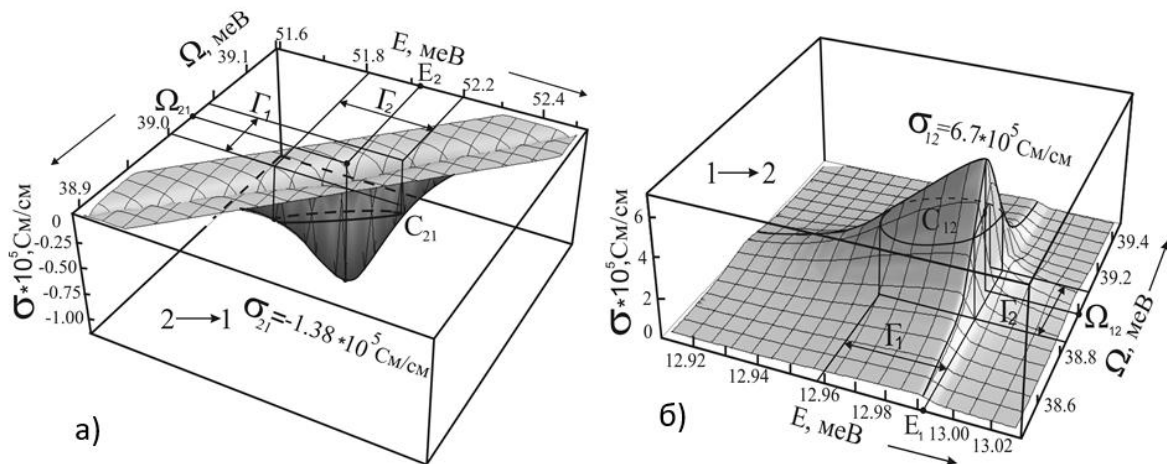


**Рис. 1.4.** Залежності резонансних енергій ( $E_n$ ) і ширин ( $\Gamma_n$ ) перших двох КСС електрона від енергії міжелектронної взаємодії  $\nu$  в несиметричній ДБРТС з геометричними параметрами  $b = 10,8 \text{ нм}$ ,  $\Delta = \Delta^- + \Delta^+ = 4,2 \text{ нм}$

Також з рис. 1.4. видно, що для кожної двобар'єрної наноструктури з різним співвідношенням  $\Delta^-$  і  $\Delta^+$  існує своє значення  $\nu_{кр}$ , яке зростає зі збільшенням різниці між товщинами обох бар'єрів. Це пояснюється тим, що міжелектронна взаємодія у симетричних ДБРТС проявляється при менших значеннях енергії міжелектронної взаємодії, ніж в структурах з різними товщинами вхідного і вихідного бар'єрів.

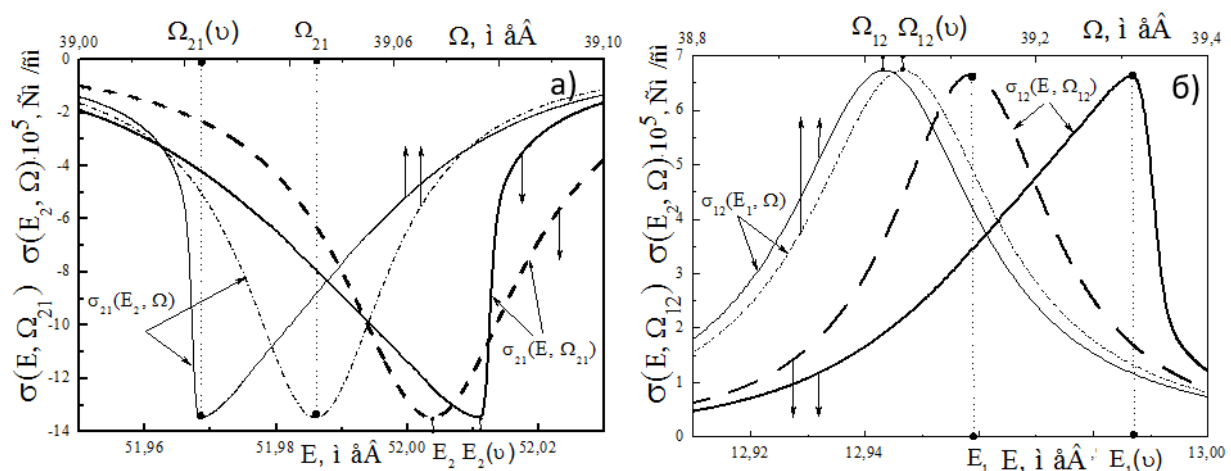
При розрахунку активної динамічної провідності ДБРТС з урахуванням міжелектронної взаємодії розглядався моноенергетичний пучок електронів з концентрацією  $n_0 = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , що часто має місце в експериментальних дослідженнях ККЛ та ККД [3–27].

Так як активна динамічна провідність  $\sigma$  ДБРТС через спектральні параметри квазістаціонарних станів електрона залежить від геометричних параметрів РТС, то вона суттєво залежить і від енергії  $E$  падаючих на систему електронів, і від енергії  $\Omega = \hbar\omega$  взаємодіючого з ними поля. Основні властивості  $\sigma$  як функції від  $E$  і  $\Omega$  для ДБРТС у випадках квантового каскадного лазера і детектора зображено на рис. 2.5.а, б. відповідно.



**Рис. 1.5.** Залежності динамічних провідностей  $\sigma(E, \Omega)$  від енергій електрона ( $E$ ) та електромагнітного поля ( $\Omega$ ), розраховані для ДБРТС з геометричними параметрами  $b = 21,6 \text{ нм}$ ;  $\Delta^- = \Delta^+ = 4,2 \text{ нм}$ . а) лазерний; б) детекторний квантові переходи

Розрахунок  $\sigma(E, \Omega)$  лазерного переходу виконувався в такому інтервалі енергій  $E$ , який містить енергію другого електронного резонансу  $E_2$  і в інтервалі енергій електромагнітного поля  $\Omega$ , що містить енергію електромагнітної хвилі  $\Omega_{21} = E_2 - E_1$  випроміненої в результаті квантового переходу з квазістаціонарного стану з енергією  $E_2$  у стан з енергією  $E_1$ . Розрахунок  $\sigma(E, \Omega)$  у детекторному переході виконувався в інтервалі енергій, що містить енергію першого електронного резонансу  $E_1$ , на який подається потік електронів, та в інтервалі енергій електромагнітного поля  $\Omega$ , що містить енергію електромагнітної хвилі  $\Omega_{12} = E_2 - E_1$ , поглинутої в результаті квантового переходу з квазістаціонарного стану з енергією  $E_1$  у стан з енергією  $E_2$ . У випадку лазерного переходу виникає від'ємна активна провідність, а у випадку детекторного – додатна.

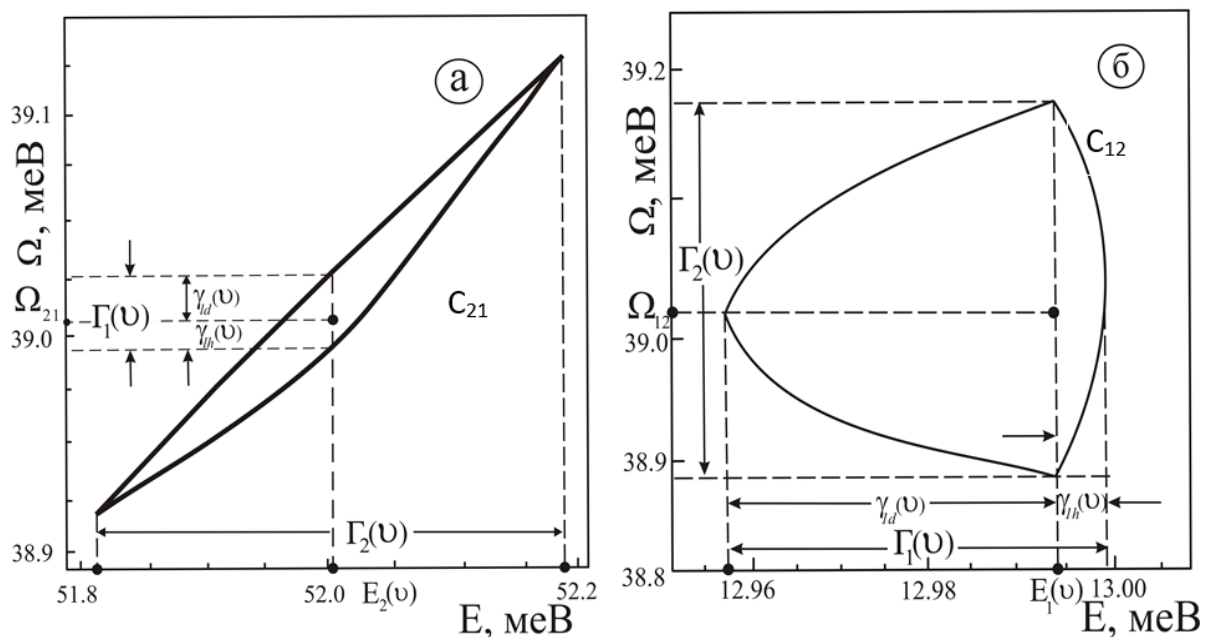


**Рис. 1.6.** Залежності негативної (а) і позитивної (б) динамічних провідностей ( $\sigma$ ) від енергій  $E$  ( $\Omega = const$ ) та  $\Omega$  ( $E = const$ ) при  $\nu = 0$  меВ (жирна суцільна та штрихова криві) і  $\nu = 5 \cdot 10^{-4}$  меВ (тонка суцільна та штрихова криві)

З рис. 1.6 а, б. видно основні властивості функції  $\sigma(E, \Omega)$  як функцій  $E$  і  $\Omega$ , що зумовлені квантовими переходами між електронними квазістаціонарними станами з випромінюванням чи поглинанням енергії

електромагнітного поля. В площині  $(E, \Omega)$  у точці  $(E_2, \Omega_{21} = E_2 - E_1)$  при лазерному переході і в точці  $(E_1, \Omega_{12} = E_2 - E_1)$  при детекторному, функція  $\sigma(E, \Omega)$  досягає відповідно мінімального  $\sigma_{21} = \sigma(E_2, \Omega_{21})$  та максимального  $\sigma_{12} = \sigma(E_1, \Omega_{12})$  значень. Перетини поверхні  $\sigma(E, \Omega)$  вертикальними площинами, що проходять через  $\sigma_{21}(E, \Omega)$  та  $\sigma_{12}(E, \Omega)$ , утворюють лінії, що мають квазілоренцову форму при  $\nu = 0$  і клиноподібну форму при великих значеннях  $\nu$  (рис. 1.6 а, б).

Як видно з рис. 1.6 а, б, екстремуми функцій  $\sigma(E, \Omega = const)$  лазерного (а) чи детекторного (б) переходів зі збільшенням взаємодії ( $\nu$ ) зміщуються в область більших енергій. При цьому в шкалі електронних енергій ( $E$ ) їм відповідають резонансні енергії другого ( $E_2$ ) та першого ( $E_1$ ) КСС відповідно.



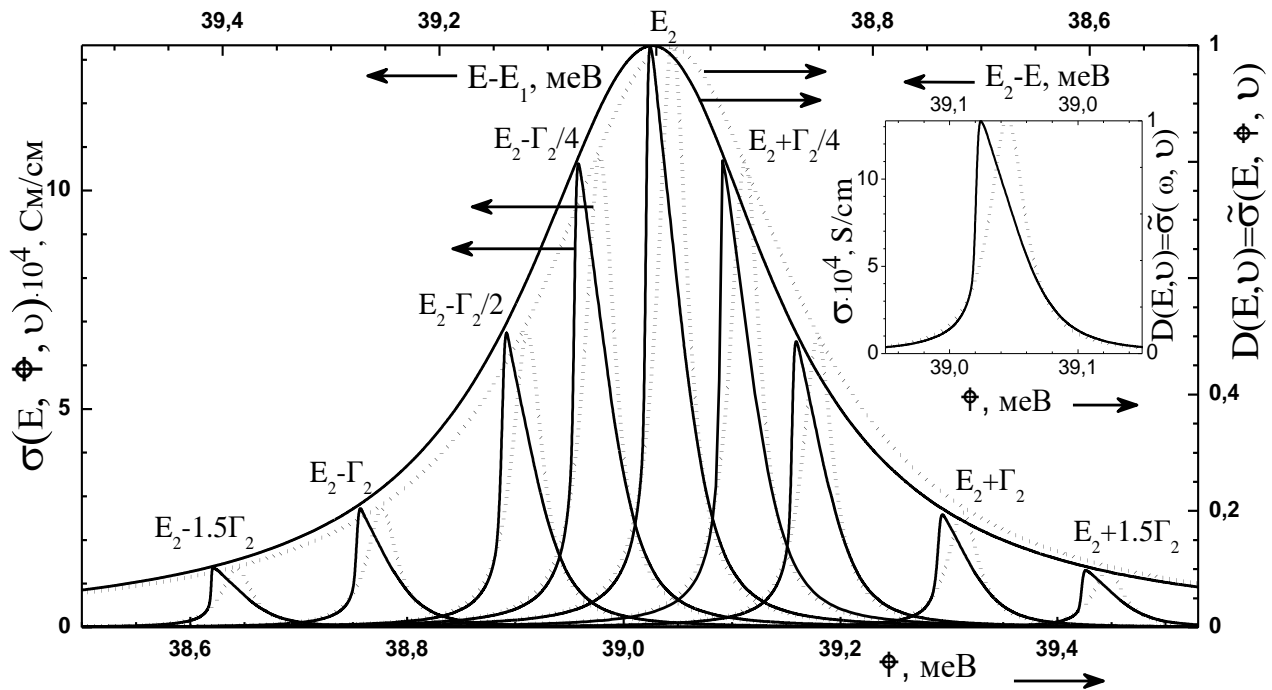
**Рис. 1.7.** Контури  $C(E, \Omega)$  негативної (а) та позитивної (б) провідностей.

Зв'язок проєкцій контурів на площину  $(E, \Omega)$  зі спектральними параметрами (резонансними енергіями та ширинами) першого та другого

КСС при  $\nu = 5 \cdot 10^{-4}$  меВ

Збільшення взаємодії ( $\nu$ ), незалежно від знака динамічної провідності  $\sigma$ , деформує її залежність від  $E$  від квазілоренцевої форми до клиноподібної так, що її низькоенергетичне крило залежить від  $E$  лінійно, а високоенергетичне круто спадає за величиною.

Перетин поверхонь  $\sigma(E, \Omega)$  горизонтальною площиною, що проходить на висоті  $\sigma_{21}/2$  чи  $\sigma_{12}/2$ , утворює замкнуті контури ( $C_{12}, C_{21}$ ), проекції яких на відповідні осі площини  $(E, \Omega)$ , як видно з рис. 1.7а, б, практично збігаються зі спектральними параметрами тих робочих КСС, між якими відбувається квантовий перехід, що формує піки  $\sigma(E, \Omega)$  у випадку лазерного (а) та детекторного (б) переходів.



**Рис. 1.8.** Активна провідність  $\sigma$  як функція від енергії  $\Omega$  електромагнітного поля при різних значеннях енергії  $E$  електрона, ліва і нижня шкали відповідно.

Коефіцієнт прозорості  $D$  як функція енергії  $E$ , права та верхня шкали відповідно. Пунктирні криві:  $\nu = 0$  меВ, суцільні криві:  $\nu = 5 \cdot 10^{-5}$  меВ

На рис. 1.8 наведено розраховані на прикладі ДБРТС з геометричними параметрами  $\Delta^- = \Delta^+ = 2,4$  нм,  $b = 21,6$  нм залежності від енергії

електромагнітного поля ( $\Omega$ ) абсолютної величини негативної провідності  $\sigma(E, \Omega, \nu)$  при  $\nu = 5 \cdot 10^{-5}$  меВ для кількох (вказаних на рисунку) значень електронної енергії ( $E$ ) у діапазоні  $E_2 - 3\Gamma_2/2 \leq E \leq E_2 + 3\Gamma_2/2$ . В околі узагальненої резонансної енергії другого КСС на основному рисунку і в околі першого КСС – на вставці у тій же шкалі енергій ( $E$ ), що і ( $\Omega$ ), і при таких самих значеннях  $\nu$ , наведено залежності коефіцієнта прозорості від енергії електронів.

З рис 1.8 видно, що незалежно від величини  $\nu$ , коефіцієнт прозорості  $D(E, \nu)$  в околі узагальненої резонансної енергії другого КСС практично збігається (так, що на рисунку різниця непомітна) із залежністю від  $\Omega$  нормованої огинаючої по енергії  $E$  функції

$$\tilde{\sigma}(E, \Omega, \nu) = \frac{\sigma(E, \Omega, \nu)}{\sigma(E_2(\nu), E_2(\nu) - E_1(\nu), \nu)}, \quad (1.59)$$

а в околі енергії першого КСС він збігається з нормованою величиною активної провідності

$$\tilde{\sigma}(E_2, \Omega, \nu) = \frac{\sigma(E_2, \Omega, \nu)}{\sigma(E_2(\nu), \Omega, \nu)}. \quad (1.60)$$

З цього рисунка видно також, що міжелектронна взаємодія, практично не впливаючи на максимальну величину провідності  $\sigma(E, \Omega)$ , слабо зміщує, пропорційно до величини енергії взаємодії  $\nu \max |\Psi(E, z)|^2$  всю функцію  $\sigma(E, \Omega)$  в область менших частот, деформуючи її форму від лоренцової до клиноподібної.



## РОЗДІЛ 2

# ТЕОРІЯ ТА МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТУНЕЛЬНОГО ТРАНСПОРТУ В НАНОСТРУКТУРАХ ЗА НАВНОСТІ ЗОВНІШНІХ ПОСТІНИХ ТА ЗМІННИХ ПОЛІВ

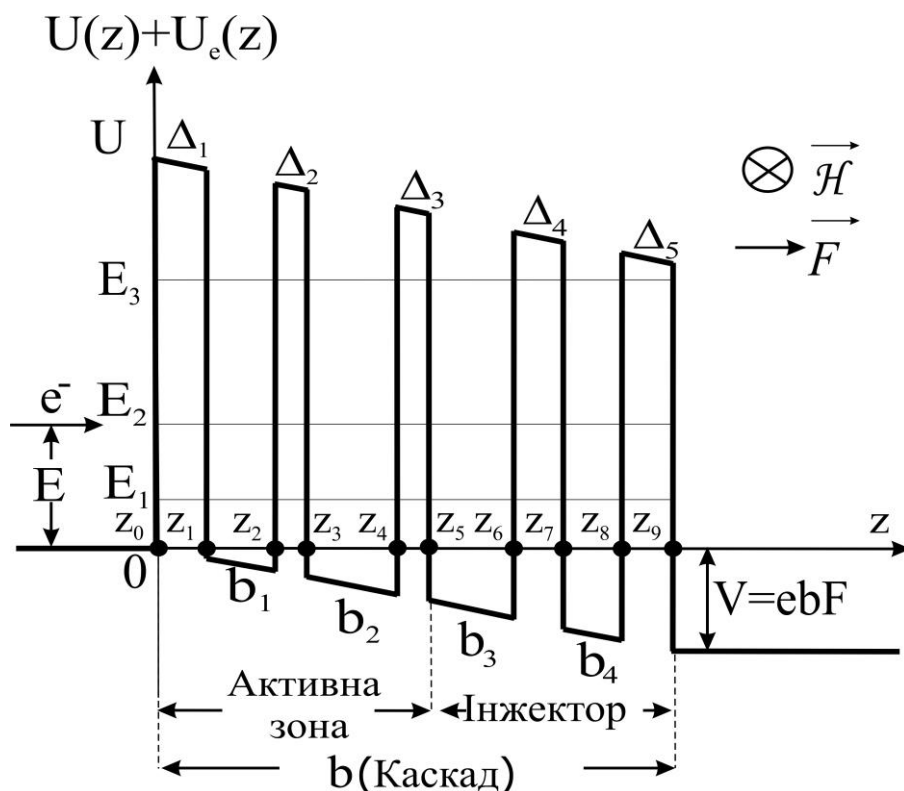
Перші експериментальні дослідження тунелювання електронів у поперечному магнітному полі було здійснено близько 15 років тому в роботі [17] для одно- та двобар'єрних РТС. У той же час було виконано перші теоретичні оцінки впливу магнітного поля на стаціонарний електронний спектр у наносистемах [34-43].

Щодо впливу поперечного магнітного поля на функціонування ККЛ, то ці питання детально вивчалися в експериментальній роботі [42], де одночасно були виконані теоретичні оцінки у межах грубої закритої моделі. Експериментально було виявлено, що збільшення напруженості магнітного поля зменшує інтенсивність лазерного випромінювання, а потім і припиняє роботу лазера. Теоретична модель, застосована авторами, не пояснювала суті спостережуваної картини і навіть знаходилась у протиріччі з експериментом, що і відмічали автори роботи [43]. Поведінка ККЛ у поперечному магнітному полі так і залишалася теоретично не з'ясованою до цього часу.

Мета цього розділу полягає в тому, щоб розвинути теорію електронного транспорту крізь плоску відкриту багат шарову РТС як каскад ККЛ, що знаходиться в поздовжньому електричному і поперечному магнітному полях. У моделі окремого відкритого каскаду ККЛ буде досліджено резонансні енергії і резонансні ширини квазістаціонарних станів електрона, а також розраховано і проаналізовано властивості активної динамічної провідності у залежності від напруженості поперечного магнітного поля. Розвинута теорія буде застосована до тієї РТС, яка слугувала каскадом експериментального ККЛ у роботі [43] і буде встановлено добре узгодження між теоретичними та експериментальними результатами.

## 2.1. Гамільтоніан системи електронів у відкритих резонансно-тунельних структурах з постійними поздовжнім електричним та поперечним магнітним полями. Квазістаціонарні стани системи

Розглядається плоска відкрита багатошарова РТС (рис 2.1), що складається з шарів-бар'єрів із однакового напівпровідникового матеріалу ( $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ ) та шарів-ям іншого матеріалу ( $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ). Перпендикулярно до площин шарів РТС прикладене постійне електричне поле напруженістю  $\vec{F}$ , а паралельно до них – постійне магнітне поле напруженістю  $\vec{H}$ . Уважається, що ззовні каскаду магнітне поле відсутнє. Саме таким був геометричний дизайн РТС окремого каскаду ККЛ, експериментально досліджуваного в роботі [118].



**Рис. 2.1.** Геометрична та енергетична схеми окремого каскаду квантового каскадного лазера при  $\mathcal{H} = 0$

Вважаються відомими товщини потенціальних бар'єрів ( $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Delta_4, \Delta_5$ ) та квантових ям ( $b_1, b_2, b_3, b_4$ ). У подальшому наносистему доцільно розглядати у

декартовій системі координат з віссю  $OZ$ , яка напрямлена перпендикулярно до її площин. Враховуючи незначну різницю між сталими ґраток шарів ям ( $a_0$ ) та бар'єрів ( $a_1$ ), будемо досліджувати наносистему в моделі прямокутних потенціальних ям та бар'єрів з різними ефективними масами електрона у них. Геометричні параметри РТС визначаються згідно з рис. 2.1. Тоді ефективна маса електрона як функція координати ( $z$ ) може бути записана у вигляді:

$$m(z) = m_0 \left\{ \theta(-z) + \sum_{p=1}^4 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] + \theta(z - b) \right\} + m_1 \left\{ \sum_{p=0}^4 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \right\}, \quad (2.1)$$

де  $m_0$  і  $m_1$  – ефективні маси електрона у шарах ям та бар'єрів відповідно.

Потенціальна енергія електрона в межах каскаду має вигляд:

$$U(z) = U \sum_{p=0}^4 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})], \quad (2.2)$$

а потенціальна енергія взаємодії електрона з постійним електричним полем напруженості  $F$  паралельної осі  $Oz$  є

$$U_e(z) = -eF \{ z [\theta(z) - \theta(z - b)] + b \theta(z - b) \}. \quad (2.3)$$

Постійне магнітне поле напруженості  $\mathcal{H}$ , що діє у межах наносистеми ( $0 \leq z \leq b$ ) і напрямлене вздовж осі  $Ox$  так, що відповідний векторний потенціал може бути записаний у вигляді:

$$\vec{A} = \left( \begin{pmatrix} \mathcal{H}z, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{pmatrix}, 0, 0 \right). \quad (2.4)$$

Щоб отримати спектральні характеристики електронних КСС у досліджуваній системі потрібно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H}(x, y, z) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z), \quad (2.5)$$

де

$$\hat{H}(x, y, z) = \frac{1}{2m(z)} \left\{ \left( \hat{p}_x - \frac{e}{c} \hat{A}_x \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right\} + U(z) + U_e(z). \quad (2.6)$$

Через залежність ефективної маси і векторного потенціалу від координати ( $z$ ), рівняння (2.5) з гамільтоніаном (2.6) точно не розв'язується. Його доцільно розв'язувати модифікованим методом Бете, для чого гамільтоніан (4.6) подається у вигляді суми основного гамільтоніана  $\hat{H}_0(x, y, z)$  і збурення  $\Delta\hat{H}(x, y, z)$ , так що

$$\hat{H}(x, y, z) = \hat{H}_0(x, y, z) + \Delta\hat{H}(x, y, z), \quad (2.7)$$

де

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\hbar^2}{2\bar{m}} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \left[ i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} z \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} \right]^2 \right\} + U(z) + U_e(z) \quad (2.8)$$

$$\Delta\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m(z)} - \frac{1}{\bar{m}} \right) \left[ \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \left( i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} z \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} \right)^2 \right]. \quad (2.9)$$

Тут величина  $\bar{m}$  має зміст скорельованої ефективної маси електрона в системі й відіграє роль варіаційного параметра у модифікованому методі Бете.

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.8) розв'язується точно. Дійсно, якщо його розв'язок шукати у вигляді

$$\Psi_0(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(k_x x + k_y y)} \Phi(E, z), \quad (2.10)$$

де  $S$  – площа основної області, то змінні  $x$  та  $y$  відділяються і для функції  $\Phi(E, z)$ , яка, через відкритість системи, залежить від енергії  $E$ , отримується одномірне рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}(z, k_x, k_y) \Phi(E, z) = E \Phi(E, z) \quad (2.11)$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}(z, k_x, k_y) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar^2}{2\bar{m}} \left[ k_y^2 + \left( k_x - \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} z \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} \right)^2 \right] + U(z) + U_e(z) \quad (2.12)$$

який залежить від квазіімпульсів  $k_x, k_y$ , як від заданих параметрів.

Знайшовши функцію  $\Phi(E, z)$ , як розв'язок рівняння (2.11) з гамільтоніаном (2.12) і підставивши її у (2.10), згідно з модифікованим методом Бете, далі виконується розрахунок матричного елемента оператора збурення (2.9) і за умови його зникнення за рахунок вибору скорельованої маси  $\bar{m}$  отримується рівняння

$$\langle \Delta \hat{H}_z | \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Phi^*(E, z) \left( \frac{1}{m(z)} - \frac{1}{\bar{m}} \right) \left\{ k_y^2 + \left( k_x - \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} z \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} \right)^2 \right\} \Phi(E, z) = 0. \quad (2.13)$$

З рівняння (2.13) отримуємо вираз для скорельованої маси  $\bar{m}$  у загальному випадку

$$\bar{m} = m_0 \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dz \Phi^*(E, z) \left\{ k_y^2 + \left( k_x - \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} z \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} \right)^2 \right\} \Phi(E, z)}{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{m_0 dz}{m(z)} \Phi^*(E, z) \left\{ k_y^2 + \left( k_x - \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} z \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} \right)^2 \right\} \Phi(E, z)}. \quad (2.14)$$

Таким чином, система рівнянь (2.11) і (2.14) виявляється самоузгодженою і дозволяє ітераційним способом з необхідною точністю знайти скорельовану масу  $\bar{m}$  та шукану хвильову функцію  $\Phi(E, z)$ .

Згідно з постановкою експерименту в роботі [118] вважається, що моноенергетичний пучок невзаємодіючих між собою електронів з концентрацією  $n_0$  і з енергією  $E$  падає, для визначеності, зліва на РТС. Це дозволяє покласти гамільтоніані (1.12)  $k_x = k_y = 0$ . Тоді для скорельованої маси  $\bar{m}$  із (1.14) одержується спрощений вираз

$$\bar{m} = m_0 \frac{\int_0^b z^2 |\Phi(E, 0 \leq z \leq b)|^2 dz}{\int_0^b z^2 \frac{m_0}{m(z)} |\Phi(E, 0 \leq z \leq b)|^2 dz}. \quad (2.15)$$

Гамільтоніан (2.12) також спрощується і стаціонарне рівняння Шредінгера набуває вигляду

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2\bar{m}} \left( \frac{e\mathcal{H}z}{c} \right)^2 \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} + U(z) + U_e(z) - E \right\} \Phi(E, z) = 0. \quad (2.16)$$

З урахуванням того, що зліва і справа від каскаду магнітне поле відсутнє, то, як видно з рівняння (2.16), в цих областях воно спрощується і набуває вигляду и системи двох рівнянь

$$\begin{cases} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E \right\} \Phi_0(E, z) = 0, & z \leq 0 \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + eFb + E = 0 \right\} \Phi_{10}(E, z). & z > b \end{cases} \quad (2.17)$$

Враховуючи, що зліва від каскаду присутні падаюча та відбита хвилі, а справа від нього – лише хвиля, яка відповідає електронному потоку, що пройшов крізь каскад ККЛ, точні розв’язки рівнянь Шредінгера (2.17) є

$$\begin{cases} \Phi_0(E, z) = A_0 e^{ik_0 z} + B_0 e^{-ik_0 z}, & z < 0, \\ \Phi_{10}(E, z) = A_{10} e^{ik_{10} z}, & z > b. \end{cases} \quad (2.18)$$

де

$$k_0 = \frac{\sqrt{2m_0 E}}{\hbar}; \quad k_{10} = \frac{\sqrt{2m_0 (E + eFb)}}{\hbar}. \quad (2.19)$$

Для довільного шару всередині каскаду ККЛ, рівняння Шредінгера (2.16) має вигляд

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2\bar{m}} \left( \frac{e\mathcal{H}z}{c} \right)^2 + U(z) - eFz - E \right\} \Phi(E, z) = 0. \quad (2.20)$$

Вводячи в рівнянні (2.20) позначення для магнітної довжини  $l$ , та координати центру циклотронної орбіти  $Z_0$

$$l = \sqrt{\frac{c\hbar}{e\mathcal{H}}}, \quad Z_0 = \frac{c^2 \bar{m} F}{e\mathcal{H}^2}, \quad (2.21)$$

та виконуючи перетворення, що ґрунтуються на виділенні повних квадратів будемо мати

$$\left\{ -\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{\bar{m}} \frac{(z - Z_0)^2}{l^4} + \frac{2(U(z) - E)}{\hbar^2} - \frac{1}{\bar{m}} \frac{Z_0^2}{l^4} \right\} \Phi(E, z) = 0. \quad (4.22)$$

Записуючи це рівняння окремо для шарів-ям та шарів-бар'єрів РТС, отримуємо систему рівнянь у вигляді:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m_p}{\bar{m}} \frac{(z - Z_0)^2}{l^4} + K_p^2 - \frac{m_p}{\bar{m}} \frac{Z_0^2}{l^4} \right\} \Phi(E, z) = 0, \quad (p = 1 \div 9), \quad (2.23)$$

де

$$m_p = \begin{cases} m_0, \\ m_1, \end{cases} \quad K_p = \begin{cases} k = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}, & p = 2, 4, 6, 8, \\ i\chi = i\sqrt{\frac{2m_1 (E - U_0)}{\hbar^2}}, & p = 1, 3, 5, 7, 9. \end{cases} \quad (2.24)$$

У системі рівнянь (2.23) та співвідношеннях (2.24) індекс  $p$  вказує на номер відповідного шару каскаду, якому відповідають потенціальні квантова яма або бар'єр. Після виконання заміни

$$\xi = \sqrt[4]{\frac{4m_p}{\bar{m}}} \frac{(z - Z_0)}{l}, \quad (2.25)$$

Отримується еквівалентна (2.23) система рівнянь, записаних у канонічній формі

$$\left[ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\xi^2}{4} + \frac{K_p^2 l^2}{2} \sqrt{\frac{\bar{m}}{m_p}} - \sqrt{\frac{m_p}{\bar{m}}} \frac{Z_0^2}{2l^2} \right] \Phi(E, \xi) = 0, \quad (p = 1 \div 9). \quad (2.26)$$



Розв'язками системи (2.26) є лінійні комбінації парної та непарної функцій параболічного циліндра  $U(\zeta, \xi)$  та  $V(\zeta, \xi)$ . Тепер, повертаючись до старих змінних, стаціонарну хвильову функцію електрона  $\Phi(E, z)$  можна подати у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi(E, z) = & \Phi_0(k_0, z)\theta(-z) + \Phi_{10}(k_{10}, z)\theta(z-b) + \\ & + \sum_{p=1}^9 \Phi_p(K_p, z) [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)] = (A_0 e^{ik_0 z} + B_0 e^{-ik_0 z})\theta(-z) + A_{10} e^{ik_{10} z} \theta(z-b) \\ & + \sum_{p=1}^9 \left[ A_p U\left(\zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l}\right) + B_p V\left(\zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l}\right) \right] [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)], \end{aligned} \quad (2.27)$$

де введено безрозмірні параметри

$$\zeta_p = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{m_p}{m}} \frac{Z_0^2}{l^2} - K_p^2 l^2 \sqrt{\frac{m}{m_p}} \right), \quad (p = 1 \div 9) \quad (2.28)$$

Функції  $U\left(\zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l}\right)$  та  $V\left(\zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l}\right)$  у виразі для хвильової функції  $\Phi(E, z)$  (2.27) пов'язані між собою співвідношенням:

$$V\left(\zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l}\right) = \frac{1}{\pi} \Gamma(-\zeta_p) \left\{ -\cos(\pi \zeta_p) U\left(\zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l}\right) + U\left(\zeta_p, -\sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l}\right) \right\}, \quad (2.29)$$

Невідомі коефіцієнти  $A_0, B_0, A_{10}, A_p, B_p$  ( $p = 1 \div 9$ ) однозначно визначаються з умов неперервності хвильової функції  $\Phi(E, z)$  та густин потоків її ймовірностей на всіх гетеромежах наносистеми:

$$\Phi_p(E, z_p) = \Phi_{p+1}(E, z_p); \quad \left. \frac{d\Phi_p(E, z)}{m_p dz} \right|_{z=z_p} = \left. \frac{d\Phi_{p+1}(E, z)}{m_{p+1} dz} \right|_{z=z_p} \quad (p = 0 \div 9), \quad (2.30)$$

а також з умови її нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(k, z) \Phi(k', z) dz = \delta(k - k'). \quad (2.31)$$

Це повністю визначає хвильову функцію  $\Phi(E, z)$ , що дозволяє виконати розрахунок функції  $W(E)$  розподілу за енергією густини ймовірності знаходження електрона в каскаді ККЛ

$$W(E) = \frac{1}{b} \int_0^b |\Phi(E, z)|^2 dz = \frac{1}{b} \left\{ \sum_{p=1}^9 \int_{z_{p-1}}^{z_p} |\Phi_p(E, z)|^2 dz \right\}. \quad (2.32)$$

Таким чином, в наближенні ефективних мас та прямокутних потенціалів отримано вирази, що дозволяють здійснити розрахунок функції розподілу густини ймовірності знаходження  $W(E)$  електрона в межах каскаду.

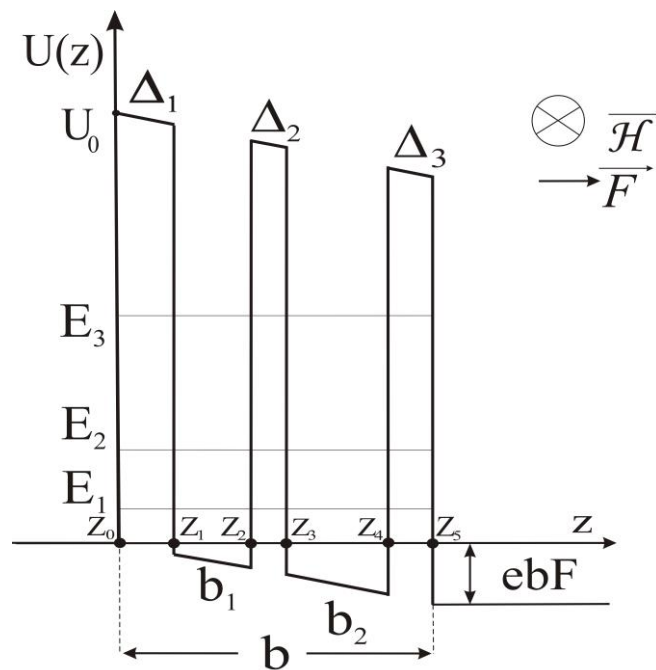
Розрахунок та аналіз залежностей функції  $W(E)$  від магнітного поля, а також спектральних характеристик КСС електрона у відкритих моделях активної зони та повного окремого каскаду квантового каскадного лазера буде виконано у наступних параграфах.

## **2.2 Квазістаціонарні стани та активна динамічна провідність електронів у моделі відкритої активної зони каскаду ККЛ у поперечному магнітному полі. Метод апроксимації ефективного потенціалу**

Будемо розглядати плоску відкриту двоямну РТС (рис 2.2), що складається з квантових бар'єрів з однакового напівпровідникового матеріалу ( $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ ) та квантових ям іншого матеріалу ( $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ). Така РТС відігравала роль активної зони в квантовому каскадному лазері в експериментальній роботі [43]. Перпендикулярно до площин шарів РТС прикладене постійне електричне поле напруженістю  $\vec{F}$ , а паралельно до них – постійне магнітне поле напруженістю  $\vec{H}$ .

Подальша постановка задачі повністю аналогічна постановці задачі у випадку розгляду окремого повного каскаду ККЛ.

Вважається, що є відомими товщини бар'єрів РТС ( $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ ) та квантових ям ( $b_1, b_2$ ). В подальшому наносистему доцільно розглядати у декартовій системі координат з віссю  $Oz$ , яка напрямлена перпендикулярно до її площин. Враховуючи незначну різницю між сталими ґраток шарів ям  $a_0$  та бар'єрів  $a_1$  будемо досліджувати наносистему в моделі прямокутних потенціальних ям та бар'єрів та різних ефективних мас електрона у них. При цьому геометричні параметри каскаду визначаються згідно рис. 2.2.



**Рис. 2.2.** Геометрична та енергетична схема активної зони квантового каскадного лазера при  $\mathcal{H} = 0$

Ефективна маса електрона має вигляд:

$$m(z) = m_0 \left\{ \theta(-z) + \sum_{p=1}^2 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] + \theta(z - z_5) \right\} +$$

$$+ m_1 \left\{ \sum_{p=0}^2 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \right\}, \quad (2.33)$$

де  $m_0$  і  $m_1$  – ефективні маси електрона у шарах ям та бар’єрів відповідно.

Потенціальна енергія електрона в межах активної зони має вигляд:

$$U(z) = U_0 \sum_{p=0}^2 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})]. \quad (2.34)$$

Гамільтоніан електрона в областях поза наносистемою є аналогічним до гамільтоніана (4.17). При цьому рух електрона у межах РТС можна розглядати в ефективному потенціалі

$$U_{eff}(z) = U(z) + U_e(z) + U_{\mathcal{H}}(z), \quad (2.35)$$

де

$$U_e(z) = -eF \{ z [\theta(z) - \theta(z - z_5)] + b \theta(z - z_5) \} \quad (2.36)$$

- внесок від електричного поля, а

$$U_{\mathcal{H}}(z) = \frac{1}{2\overline{m}} \left( \frac{e\mathcal{H}z}{c} \right)^2 [\theta(z) - \theta(z - b)]. \quad (4.37)$$

- потенціальна енергія взаємодії електрона з магнітним полем.

Тепер для хвильової функції електрона, що є розв'язком стаціонарних рівнянь Шредінгера (2.17) (2.20) з гамільтоніанами електрона, які включають ефективний потенціал (4.35) в межах РТС отримуємо

$$\begin{aligned} \Phi(E, z) = & \Phi_0(k_0, z)\theta(-z) + \Phi_6(k_6, z)\theta(z-b) + \\ & + \sum_{p=1}^5 \Phi_p(K_p, z) [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)] = (A_0 e^{ik_0 z} + B_0 e^{-ik_0 z})\theta(-z) + A_6 e^{ik_6 z} \theta(z-b) \\ & + \sum_{p=1}^5 \left[ A_p U \left( \zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l} \right) + B_p V \left( \zeta_p, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{m}} \frac{(z-Z_0)}{l} \right) \right] [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)], \end{aligned} \quad (2.38)$$

де

$$\zeta_p = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{m_p}{m}} \frac{Z_0^2}{l^2} - K_p^2 \sqrt{\frac{m}{m_p}} \right), K_p = \begin{cases} k = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 E}, & p = 2, 4, \\ i\chi = i\hbar^{-1} 2m_1 (E - U_0), & p = 1, 3, 5.. \end{cases} \quad k_6 = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 (E + eFb)}. \quad (2.39)$$

Усі невідомі коефіцієнти  $A_0, B_0, A_6, A_p, B_p$  ( $p = 1 \div 5$ ) однозначно визначаються із умов неперервності хвильової функції  $\Phi(E, z)$  та густин потоків її ймовірностей на всіх гетеромежах наносистеми

$$\Phi_p(E, z_p) = \Phi_{p+1}(E, z_p); \quad \left. \frac{d\Phi_p(E, z)}{m_p dz} \right|_{z=z_p} = \left. \frac{d\Phi_{p+1}(E, z)}{m_{p+1} dz} \right|_{z=z_p} \quad (p = 0 \div 5), \quad (2.40)$$

а також з умови її нормування виду (2.31).

Це повністю визначає хвильову функцію  $\Phi(E, z)$ , що дозволяє виконати розрахунок функції  $W(E)$  розподілу за енергією густини ймовірності знаходження електрона в активній зоні ККЛ

$$W(E) = \frac{1}{z_5} \int_0^{z_5} |\Phi(E, z)|^2 dz = \frac{1}{z_5} \left\{ \sum_{p=1}^5 \int_{z_{p-1}}^{z_p} |\Phi_p(E, z)|^2 dz \right\}. \quad (2.41)$$

Для знаходження електронної динамічної провідності активної зони ККЛ відносно пучка невзаємодіючих між собою електронів з концентрацією  $n_0$  в поздовжньому електричному і поперечному магнітному полях, необхідно розв'язати повне рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(E, z, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U_{eff}(z) + H(z, t) \right) \Phi(E, z, t), \quad (2.42)$$

де

$$H(z, t) = -e\epsilon \{ z[\theta(z) - \theta(z - z_5)] + z_5 \theta(z - z_5) \} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (2.43)$$

- гамільтоніан взаємодії електрона зі змінним у часі електромагнітним полем з частотою  $\omega$  та амплітудою  $\epsilon$  напруженості його електричної складової.

Через свою аналітичну складність рівняння (2.42) не має точного розв'язку. Проте в так званому, малосигнальному наближенні, можна шукати його розв'язок, лінеаризуючи ефективний потенціал  $U_{eff}(z)$  у всіх шарах РТС, яка виступає активною зоною ККЛ, й розв'язуючи спочатку стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U_{eff}(z) \right] \Phi(E, z) = E \Phi(E, z). \quad (2.44)$$

Лінеаризація ефективного потенціалу  $U_{eff}(z)$ , що визначається співвідношенням (4.35), здійснюється так. Кожен шар РТС розбивається на певне число  $N$  частин. Тоді нові координати шарів  $z_s$  будуть пов'язаними з координатами старих шарів  $z_p$ , що є межами поділу напівпровідникових середовищ потенціальних ям та бар'єрів таким співвідношенням:

$$z_s = z_p + \frac{z_{p+1} - z_p}{N}, \quad p = 0 \div 4. \quad (2.45)$$

Тепер лінеаризований ступінчатий ефективний потенціал  $\tilde{U}_{eff}(z)$  можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \tilde{U}_{eff}(z) &= \sum_{s=0}^N U_{eff}(z_s) [\theta(z - z_{s-1}) - \theta(z - z_s)] = \\ &= \sum_{s=0}^N (U(z_s) + U_e(z_s) + U_B(z_s)) [\theta(z - z_{s-1}) - \theta(z - z_s)], \end{aligned} \quad (2.46)$$

де

$$z_{-1} = z_0 = 0; \quad z_N = z_5 \quad (2.47)$$

і

$$U(z_s) = \begin{cases} U_0, & z_s \in [z_0, z_1] \cup [z_2, z_3] \cup [z_4, z_5] \\ 0, & z_s \in [z_1, z_2] \cup [z_3, z_4]. \end{cases} \quad (2.48)$$

згідно з геометричними параметрами активної зони ККЛ, визначених з рис. 2.2.

Стаціонарне рівняння Шредінгера (2.44) з лінеаризованим ефективним потенціалом (2.46) зводиться до рівняння для знаходження функцій  $\Phi_s(E, z)$

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + K_s^2(z) \right] \Phi_s(E, z) = 0, \quad (2.49)$$

розв'язки якого мають вигляд:

$$\Phi_s(K_s, z) = A_s e^{iK_s(z)z} + B_s e^{-iK_s(z)z}, \quad (2.50)$$

де

$$K_s(z) = \sqrt{\frac{2m(z)(E - \tilde{U}_{eff}(z))}{\hbar^2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2m_0(E - \tilde{U}_{eff}(z))}{\hbar^2}}, & z \in [z_1, z_2] \cup [z_3, z_4], \\ \sqrt{\frac{2m_1(E - \tilde{U}_{eff}(z))}{\hbar^2}}, & z \in [z_0, z_1] \cup [z_2, z_3] \cup [z_4, z_5]. \end{cases} \quad (2.51)$$

Таким чином, з урахуванням граничних умов та умови нормування (4.31) хвильова функція  $\Phi_s(E, z)$  однозначно визначена

$$\begin{aligned} \Phi_s(E, z) &= \Phi_0(k_0, z)\theta(-z) + \Phi_{N+1}(k_{N+1}, z)\theta(z - b) + \\ &+ \sum_{S=1}^N \Phi_s(K_s, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = (A_0 e^{ik_0 z} + B_0 e^{-ik_0 z})\theta(-z) + \\ &+ A_{N+1} e^{ik_{N+1} z} \theta(z - b) + \sum_{S=1}^N (A_s e^{iK_s(z)z} + B_s e^{-iK_s(z)z}) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \end{aligned} \quad (2.52)$$

При цьому зрозуміло, що точність розрахунків, які виконувались за умов застосованої апроксимації вкладу магнітного та електричного полів ефективним потенціалом, визначається в залежності від числа розбиттів  $N$  шарів активної зони ККЛ. Також, оскільки в ефективний потенціал  $U_{eff}(z)$  входить квадратичний за магнітним полем доданок, то, очевидно, що зі збільшенням напруженості магнітного поля для збереження заданої точності розрахунків, яка задається очевидним співвідношенням між квадратами модулів хвильових функцій  $\Phi(E, z)$  і  $\Phi_s(E, z)$

$$\varepsilon = \frac{\left| |\Phi(E, z)|^2 - |\Phi_s(E, z)|^2 \right|}{|\Phi(E, z)|^2} \ll 1, \quad (2.53)$$

необхідно збільшувати кількість точок розбиття шарів РТС у апроксимуючому ефективному потенціалі (4.46).

Уважаючи амплітуду високочастотного електромагнітного поля малою, в одномодовому наближенні хвильова функція  $\Phi(E, z, t)$  як розв'язок повного



рівняння Шредінгера з апроксимованим потенціалом (2.46) може бути представлена як

$$\Phi(E, z, t) = \Phi(E, z) e^{-i\omega_0 t} + \Phi_{+1}(E, z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Phi_{-1}(E, z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t}. (\omega_0 = \hbar^{-1} E) \quad (2.54)$$

Підставляючи тепер хвильову функцію у вигляді (2.54) в рівняння Шредінгера (2.42) та зберігаючи в ньому доданки одного (першого) порядку мализни, отримаємо систему двох неоднорідних диференціальних рівнянь для знаходження функцій  $\Phi_{\pm}(E, z)$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \tilde{U}_{eff}(z) - (E \pm \Omega) \right\} \Phi_{\pm 1}(E, z) = eCz \Phi(E, z). \quad (\Omega = \hbar\omega). \quad (2.55)$$

Рівняння (4.55) має точні розв'язки у вигляді суперпозиції функцій

$$\Phi_{\pm 1}(E, z) = \Phi_{\pm}(E, z) + \phi_{\pm}(E, z). \quad (2.56)$$

У співвідношенні (2.56) функції  $\Phi_{\pm}(E, z)$  – розв'язки однорідних рівнянь (2.55)

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm}(E, z) &= \Phi_{\pm}^{(0)}(E, \pm\Omega, z) \theta(-z) + \Phi_{\pm}^{(N+1)}(E, \pm\Omega, z) \theta(z-b) + \\ &+ \sum_{s=1}^N \left[ A_{\pm}^{(s)} e^{iK_{\pm}^{(s)}(z)z} + B_{\pm}^{(p)} e^{-iK_{\pm}^{(s)}(z)z} \right] \left[ \theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p) \right] = \\ &= B_{\pm}^{(0)} e^{-iK_{\pm}^{(0)}z} \theta(-z) + A_{\pm}^{(N+1)} e^{iK_{\pm}^{(N+1)}z} \theta(z-b) + \sum_{s=1}^N \left[ A_{\pm}^{(s)} e^{iK_{\pm}^{(s)}(z)z} + B_{\pm}^{(p)} e^{-iK_{\pm}^{(s)}(z)z} \right] \left[ \theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p) \right] \end{aligned} \quad (2.57)$$

де

$$k_{\pm}^{(0)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(E \pm \Omega)}; \quad k_{\pm}^{(N+1)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(E \pm \Omega - U_0 + eFb)};$$

$$K_{\pm}^{(S)}(z) = \hbar^{-1} \sqrt{2m(z)(E - \tilde{U}_{eff}(z) \pm \Omega)} = \begin{cases} \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(E - \tilde{U}_{eff}(z) \pm \Omega)}, & z \in [z_1, z_2] \cup [z_3, z_4], \\ \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(E - \tilde{U}_{eff}(z) \pm \Omega)}, & z \in [z_0, z_1] \cup [z_2, z_3] \cup [z_4, z_5]. \end{cases} \quad (2.58)$$

Функції  $\phi_{\pm}(E, z)$ , що є розв'язками неоднорідних диференціальних рівнянь (2.55) мають точний аналітичний вигляд:

$$\begin{aligned} \phi_{\pm}(E, z) &= \sum_{s=1}^N \phi_{\pm}^{(s)}(z) [\theta(z - z_{s-1}) - \theta(z - z_s)] + \phi_{\pm}^{(N+1)}(b) \theta(z - b) = \\ &= \sum_{s=1}^N \left[ \mp \frac{e\mathcal{C}}{\Omega} z \Phi_s(E, z) + \frac{e\hbar^2 \mathcal{C}}{m(z)\Omega^2} \frac{d\Phi_s(E, z)}{dz} \right] \times \\ &\times [\theta(z - z_{s-1}) - \theta(z - z_s)] \mp \frac{e\mathcal{C}}{\Omega} b \Phi_{N+1}(E, b) \theta(z - b). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Далі, подібно до попереднього розділу, з урахуванням граничних умов неперервності хвильової функції та потоку густини ймовірності однозначно визначаються усі невідомі коефіцієнти  $B_{\pm}^{(0)}$ ,  $A_{\pm}^{(N+1)}$ ,  $A_{\pm}^{(S)}$ ,  $B_{\pm}^{(S)}$ , а отже, і сама хвильова функція  $\Phi(E, z, t)$ , і потік густини струму, і активна динамічна провідність

$$\sigma(E, \Omega) = \sigma^+(E, \Omega) + \sigma^-(E, \Omega), \quad (2.60)$$

яка описується парціальними складовими, зумовленими процесами з випромінюванням  $\sigma^{r\pm}$  та поглинанням  $\sigma^{a\pm}$  енергії електромагнітного поля, що мають наступний аналітичний вигляд

$$\begin{aligned} \sigma^+(E, \Omega) &= \sigma^{a+}(E, \Omega) + \sigma^{r+}(E, \Omega) = \frac{\hbar \Omega n_0}{2z_5 m_0 \mathcal{C}^2} \left( k_+^{(6)} |A_+^{(6)}|^2 - k_-^{(6)} |A_-^{(6)}|^2 \right), \\ \sigma^-(E, \Omega) &= \sigma^{a-}(E, \Omega) + \sigma^{r-}(E, \Omega) = \frac{\hbar \Omega n_0}{2z_5 m_0 \mathcal{C}^2} \left( k_+^{(0)} |B_+^{(0)}|^2 - k_-^{(0)} |B_-^{(0)}|^2 \right). \end{aligned} \quad (2.61)$$

Отже, у підході апроксимованого ефективного потенціалу побудована теорія спектральних параметрів та активної динамічної провідності відкритої РТС, як активної зони окремого каскаду ККЛ у постійних електричному та магнітному полях. Теорія активної динамічної провідності цілого каскаду ККЛ у цих полях, на основі точного розв'язку повного рівняння Шредінгера в одномодовому наближенні буде розвинена в наступному параграфі.

### **2.3. Активна динамічна провідність та відносна інтегральна інтенсивність випромінювання у відкритій моделі окремого каскаду ККЛ у поперечному магнітному полі**

Для побудови теорії активної динамічної провідності електронів з концентрацією в падаючому пучку  $n_0$  багатошаровою РТС у відкритій моделі окремого каскаду (рис. 2.1) в поперечному магнітному полі з урахуванням руху лише вздовж осі  $Oz$  будемо розв'язувати повне рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(E, z, t)}{\partial t} = (H(z) + H(z, t))\Phi(E, z, t), \quad (2.62)$$

де

$$H(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_e(z) + \frac{1}{2\bar{m}} \left( \frac{e\mathcal{H}z}{c} \right)^2 \begin{cases} 1, & 0 \leq z \leq b \\ 0, & z \leq 0, z > b \end{cases} \quad (2.63)$$

гамільтоніан стаціонарної задачі а

$$H(z, t) = -e\mathcal{E} \{ z[\theta(z) - \theta(z - b)] + b\theta(z - b) \} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (2.64)$$

- гамільтоніан взаємодії електрона зі змінним у часі електромагнітним полем з частотою  $\omega$  та амплітудою  $\mathcal{E}$  напруженості його електричної складової.

Розв'язок рівняння (2.62) для функції  $\Phi(E, z, t)$  шукається, як і попередніх розділах, у одномодовому наближенні

$$\Phi(E, z, t) = \Phi(E, z)e^{-i\omega_0 t} + \Phi_{+1}(E, z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Phi_{-1}(E, z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t}, (\omega_0 = \hbar^{-1}E) \quad (2.65)$$

де  $\Phi(E, z)$  – точний розв'язок стаціонарної задачі з гамільтоніаном (2.63), а для функцій  $\Phi_{\pm 1}(E, z)$  у межах РТС отримується система неоднорідних рівнянь

$$\left[ -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{m_p}{\bar{m}} \frac{(z - Z_0)^2}{l^4} + \frac{2m_p(U(z) - E \pm \Omega)}{\hbar^2} - \frac{m_p}{\bar{m}} \frac{Z_0^2}{l^4} \right] \Phi_{\pm}(E, z) = \frac{2m_p}{\hbar^2} e\mathcal{C}z\Phi(E, z), (p = 1 \div 9) \quad (2.66)$$

де ефективні маси  $m_p$  електрона в  $p$ -ій області каскаду визначаються згідно співвідношень (4.24),  $l = \sqrt{c\hbar/e\mathcal{H}}$ ,  $Z_0 = c^2\bar{m}F/e\mathcal{H}^2$ .

Знерозміривши систему рівнянь (4.66) заміною  $\xi = \sqrt{\frac{4m_p}{\bar{m}}} \frac{(z - Z_0)}{l}$ , будемо мати систему неоднорідних диференціальних рівнянь відносно функцій  $\Phi_{\pm 1}(E, \xi)$

$$\left[ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\xi^2}{4} + \frac{\sqrt{m_p\bar{m}}(U(\xi) - E \pm \Omega)}{\hbar^2} l^2 - \sqrt{\frac{m_p}{\bar{m}}} \frac{Z_0^2}{2l^2} \right] \Phi_{\pm}(E, \xi) = \frac{\sqrt{m_p\bar{m}}l^3}{\hbar^2} \left( \xi \sqrt{\frac{\bar{m}}{4m_p}} + \frac{Z_0}{l} \right) e\mathcal{C}\Phi(E, \xi). (p = 1 \div 9). \quad (2.67)$$

Розв'язком системи диференціальних рівнянь (2.67) є суперпозиція функцій

$$\Phi_{\pm 1}(E, \xi) = \Phi_{\pm}(E, \xi) + \phi_{\pm}(E, \xi). \quad (2.68)$$

Тут функції  $\Phi_{\pm}(E, \xi)$  є розв'язками однорідних рівнянь (2.66)

$$\left[ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\xi^2}{4} + \frac{\sqrt{m_p\bar{m}}(U(\xi) - E \pm \Omega)}{\hbar^2} l^2 - \sqrt{\frac{m_p}{\bar{m}}} \frac{Z_0^2}{2l^2} \right] \Phi_{\pm}(\xi) = 0. (p = 1 \div 9). \quad (2.68)$$

Повертаючись у розв'язках рівнянь (2.68) до змінної  $z$ , отримуємо

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm}(E, z) = & \Phi_{\pm}^{(0)}(E, z)\theta(-z) + \Phi_{\pm}^{(10)}(E, z)\theta(z-b) + \\ & + \sum_{p=1}^9 \Phi_{\pm}^{(p)}(E, z) [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)] = B_{\pm}^{(0)} e^{-ik_{\pm}^{(0)}z} \theta(-z) + A_{\pm}^{(10)} e^{ik_{\pm}^{(10)}z} \theta(z-b) + \\ & + \sum_{p=1}^9 \left\{ A_{\pm}^{(p)} U \left[ \zeta_{\pm}^{(p)}, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{\bar{m}}} \frac{(z-Z_0)}{l} \right] + B_{\pm}^{(p)} V \left[ \zeta_{\pm}^{(p)}, \sqrt[4]{\frac{4m_p}{\bar{m}}} \frac{(z-Z_0)}{l} \right] \right\} [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)] \end{aligned} \quad (2.69)$$

де

$$\begin{aligned} \zeta_{\pm}^{(p)} = & \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{m_p}{\bar{m}}} \frac{Z_0^2}{l^2} - K_{\pm(p)}^2 l^2 \sqrt{\frac{\bar{m}}{m_p}} \right), \quad K_{\pm(p)} = \begin{cases} k_{\pm}, & p = 2, 4, 6, 8, \\ i\chi_{\pm}, & p = 1, 3, 5, 7, 9. \end{cases} \quad k_{\pm} = \sqrt{\frac{2m_0(E \pm \Omega)}{\hbar^2}}, \\ \chi_{\pm} = & \sqrt{\frac{2m_1(E - U_0 \pm \Omega)}{\hbar^2}}, \quad k_{\pm}^{(0)} = \sqrt{\frac{2m_0(E \pm \Omega)}{\hbar^2}}, \quad k_{\pm}^{(10)} = \sqrt{\frac{2m_0(E \pm \Omega + V_0)}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Частинні розв'язки диференціальних рівнянь (2.66) також мають точний аналітичний вигляд

$$\begin{aligned} \phi_{\pm}(E, z) = & \mp \frac{e\epsilon b}{\Omega} \Phi_{10}(E, z)\theta(z-b) + \sum_{p=1}^9 \frac{e\sqrt{m_p \bar{m}} \epsilon l^3}{\hbar^2} [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)] \times \\ & \times \int_1^{\xi} \left( \eta \sqrt[4]{\frac{\bar{m}}{4m_p}} + \frac{Z_0}{l} \right) [U(\zeta_{\pm}^{(p)}, \xi) V(\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta) - V(\zeta_{\pm}^{(p)}, \xi) U(\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta)] \Phi_p(\eta) d\eta \\ & \times \int_1^{\xi} \frac{[U(\zeta_{\pm}^{(p)} + 1, \eta) - \eta U(\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta)] V(-\zeta_{\pm}^{(p)} - 1, \eta) - i U(\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta) V(-\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta)}{[U(\zeta_{\pm}^{(p)} + 1, \eta) - \eta U(\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta)] V(-\zeta_{\pm}^{(p)} - 1, \eta) - i U(\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta) V(-\zeta_{\pm}^{(p)}, \eta)} d\eta. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Далі, з використанням умов неперервності повної хвильової функції  $\Phi(E, z, t)$  та густини її потоку на усіх межах наносистеми в довільний момент часу  $t$  однозначно визначаються усі невідомі коефіцієнти  $B_{\pm}^{(0)}$ ,  $A_{\pm}^{(10)}$ ,  $A_{\pm}^{(p)}$ ,  $B_{\pm}^{(p)}$  ( $p = 1 \div 9$ ), а отже, й сама функція  $\Phi(E, z, t)$ , й потік густини струму, й активна динамічна провідність, яка може бути представлена у вигляді двох парціальних складових  $(\sigma^+, \sigma^-)$ , що зумовлюються процесами поглинання та випромінювання енергії електромагнітного поля

$$\sigma^+(E, \Omega) = \sigma^{a+}(E, \Omega) + \sigma^{r+}(E, \Omega) = \frac{\hbar \Omega n_0}{2bm_0 \epsilon^2} \left( k_+^{(10)} |A_+^{(10)}|^2 - k_-^{(10)} |A_-^{(10)}|^2 \right),$$

$$\sigma^-(E, \Omega) = \sigma^{a-}(E, \Omega) + \sigma^{r-}(E, \Omega) = \frac{\hbar \Omega n_0}{2bm_0 \epsilon^2} \left( k_+^{(0)} |B_+^{(0)}|^2 - k_-^{(0)} |B_-^{(0)}|^2 \right). \quad (2.72)$$

Якщо на РТС не діє зовнішнє електромагнітне поле, а енергія  $E$  падаючих на неї електронів збігається з резонансною енергією  $E_n$  одного зі збуджених КСС, то внаслідок переважання квантових переходів у низькоенергетичні стани ( $n' < n$ ) буде виникати випромінювання електромагнітних хвиль з енергією  $\Omega$  порядку  $\Omega_{nn'} = E_n - E_{n'}$ , а сама РТС матиме від'ємну активну динамічну провідність. Оскільки потужність лазерного випромінювання з частотою  $\omega = \hbar^{-1}\Omega$ , яке створюється електронним потоком з енергією  $E$ , що проходить через РТС, є відома

$$P(E, \Omega) = 2bF^2 |\sigma(E, \Omega)|, \quad (2.73)$$

то можна визначити експериментально вимірювану величину відносної інтегральної інтенсивності випромінювання в залежності від напруженості магнітного поля

$$I(E, \Omega_{nn'}, \mathcal{H}) = \int_{\Omega_{nn'}^<}^{\Omega_{nn'}^>} |\sigma(E, \Omega, \mathcal{H})| d\Omega \bigg/ \int_{\Omega_{nn'}^<}^{\Omega_{nn'}^>} |\sigma(E, \Omega, \mathcal{H} = 0)| d\Omega, \quad (2.74)$$

де  $\Omega_{nn'}^<$ ,  $\Omega_{nn'}^>$  – енергії поля, при яких реалізуються відповідно нижній і верхній мінімуми функції  $|\sigma(E, \Omega, \mathcal{H})|$  при  $E = \text{const}$  і  $\mathcal{H} = \text{const}$ .

Отже, побудована теорія спектральних параметрів електрона та активної динамічності провідності багат шарової РТС у постійних повздовжньому електричному та поперечному магнітному полях у моделі відкритої наносистеми на основі розв'язку відповідних стаціонарного та повного рівнянь Шредінгера з апроксимацією вкладу від електричного та магнітного полів ефективним

потенціалом, а також точного розв'язку цих рівнянь. Розвинена теорія дозволяє виконати розрахунок залежностей згаданих фізичних величин від величини магнітного поля й порівняти отримані результати з експериментальними даними для досліджуваних ККЛ у поперечному магнітному полі, що і буде виконано далі.

#### **2.4. Властивості електронних квазістаціонарних станів та активної динамічної провідності каскаду квантового каскадного лазера в поперечному магнітному полі**

Розрахунок і аналіз спектральних параметрів електронних КСС, активної динамічної провідності та відносної інтегральної інтенсивності випромінювання виконувався на прикладі відкритої багатошарової РТС на основі  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  квантових ям та  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}$  бар'єрів, як окремого каскаду ККЛ, що досліджувався в експериментальній роботі [43].

Геометричні параметри РТС каскаду ККЛ вибирались такими, як у експериментальній роботі [118] згідно з рис. 4.1. Товщини в нанометрах зліва направо по РТС такі: шарів-бар'єрів (2,4, 2,5, 2,5, 2,5, 2,4), шарів-ям – (4,2, 7,4, 5,5, 4,6). Згідно з роботою [43]  $m_0 = 0.043m_e$ ,  $m_1 = 0.083m_e$ ,  $U_0 = 516$  меВ,  $F = 55$  кВ/см,  $n_0 = 9,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

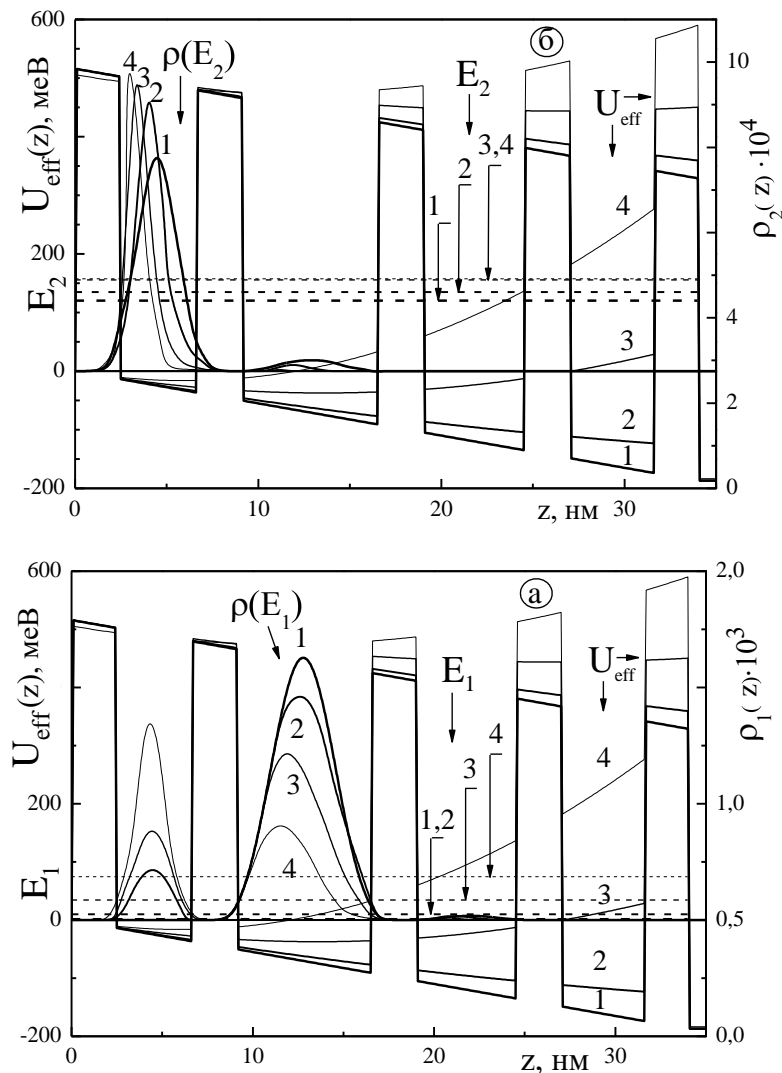
Оскільки в цитованій експериментальній роботі лазерне випромінювання спостерігалось на довжині хвилі  $\lambda = 9.5 \text{ мкм}$  ( $\Omega \approx 130$  меВ) за рахунок квантових переходів між двома нижніми електронними КСС, то теоретичний розрахунок також буде стосуватися КСС нижньої частини спектру.

Для порівняння між собою теоретичних та експериментальних результатів, а також для того, щоб з'ясувати причини встановленого на експерименті різкого затухання відносної інтегральної інтенсивності лазерного випромінювання зі збільшенням величини напруженості магнітного поля, виконувався розрахунок не тільки величини  $\sigma(E, \Omega, \mathcal{H})$  та її парціальних складових ( $\sigma^\pm$ ) при  $E = E_2$  в околі  $\Omega = \Omega_{21} = E_2 - E_1$ , але й резонансних енергій та ширин перших трьох КСС, у яких електрон локалізований в активній зоні КСС.

Перш ніж аналізувати резонансні енергії ( $E_n$ ) та резонансні ширини ( $\Gamma_n$ ) КСС, доцільно виконати розрахунок також і функції просторового розподілу ймовірності знаходження електрона в  $n$ -ному КСС

$$\rho(z) = \int_{E_{n-1}}^{E_n} |\Phi(E, z)|^2 dE, \quad (2.75)$$

де  $\bar{E}_0 = 0$ ,  $\bar{E}_n$  – положення  $n$ -го мінімуму функції розподілу густини ймовірності  $W(E)$  у шкалі енергій.



**Рис. 2.3.** Залежності  $U_{eff}(z)$ , а)  $E_1$ ,  $\rho(E_1, z)$ ; б)  $E_2$ ,  $\rho(E_2, z)$  при чотирьох значеннях напруженості магнітного поля: 1 – 0 Тл, 2 – 5 Тл, 3 – 10 Тл, 4 – 15 Тл

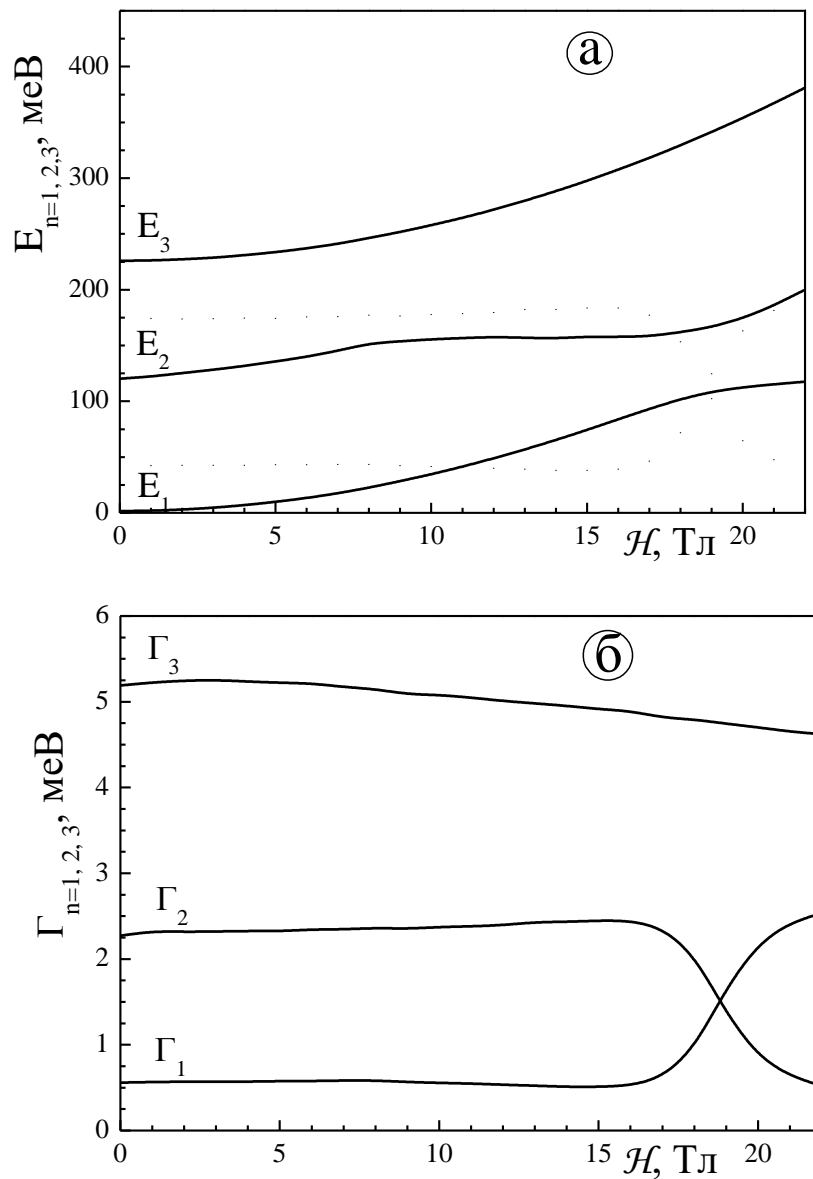


На рис. 2.3 а, б наведені результати розрахунку ефективного потенціалу  $U_{eff}(z)$ , густини ймовірності  $\rho(z)$ , резонансних енергій  $E_1, E_2$  робочих КСС, між якими здійснюється квантовий перехід ( $2 \rightarrow 1$ ) з випромінюванням енергії ( $\Omega_{21} = E_2 - E_1$ ) електромагнітного поля при чотирьох значеннях напруженості магнітного поля.

З рис. 2.3 видно, що при відсутності магнітного поля електрон у другому КСС (рис. 2.3 б) локалізується переважно в першій (вхідній) потенційній ямі активної зони, а в першому КСС (рис. 2.3 а) – у другій. Тому в досліджуваній моделі відкритої РТС, як і в моделі відповідної закритої системи [43], відбувається інтенсивне випромінювання електромагнітного поля, в, так званому "косому переході". Зі збільшенням величини магнітного поля  $\mathcal{H}$  електрон в другому КСС ще більше локалізується в першій ямі, тоді як у першому КСС він делокалізується в другій ямі і поступово переміщується у першу яму. Квантовий перехід при стає більш "прямим", через що, як буде видно далі, інтенсивність виникаючого електромагнітного випромінювання істотно зменшується.

Як відомо з експериментальної роботи [43], дизайн двоямної активної зони був утворений таким чином (рис. 2.1), щоб при потраплянні електронів у РТС з енергією  $E \sim E_2$  виникало лазерне випромінювання унаслідок квантового переходу з другого у перший КСС. Розрахунок резонансних енергій та ширин перших трьох КСС при  $\mathcal{H} = 0$  Тл показав, що отримана різниця резонансних енергій  $\Omega_{21} - \Omega_{32} = 13.6$  меВ ( $\Omega_{21} = 118.6$  меВ,  $\Omega_{32} = 105$  меВ) є досить близькою до резонансних ширин другого та третього КСС ( $\Gamma_1 = 0.56$  меВ,  $\Gamma_2 = 2.27$  меВ,  $\Gamma_3 = 5.19$  меВ). Отже, виникає питання, чи не може зміна величини напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  привести до того, що різниці резонансних енергій електронних КСС  $E_2 - E_1$  і  $E_3 - E_2$  будуть практично однаковими, внаслідок чого процеси випромінювання можуть компенсуватися процесами поглинання електромагнітного поля. Щоб дати відповідь на це запитання виконувався розрахунок  $E_{n=1,2,3}(\mathcal{H})$ ,  $\Gamma_{n=1,2,3}(\mathcal{H})$  в залежності від величини напруженості

магнітного поля  $\mathcal{H}$  у широкому діапазоні (0-22Тл). Розраховані залежності РЕ та РШ приведено на рис. 2.4 а, б.

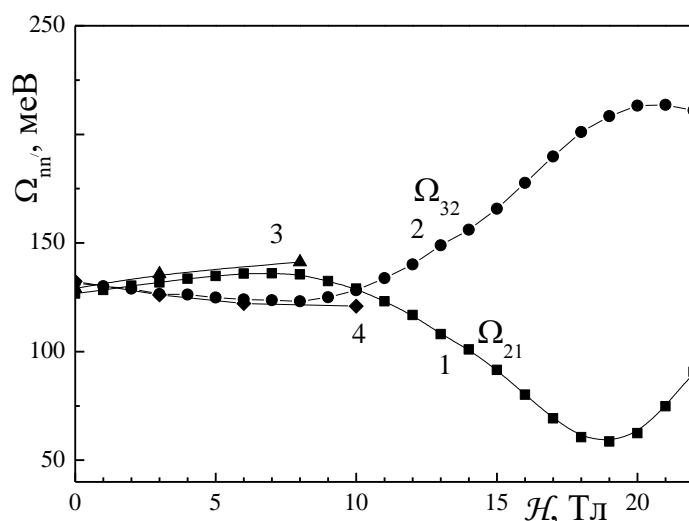


**Рис. 2.4.** Залежності від напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  : а) резонансних енергій ( $E_{n=1,2,3}$ ); б) резонансних ширин ( $\Gamma_{n=1,2,3}$ )

З рис. 2.4 а, б видно, що зі збільшенням величини магнітного поля  $\mathcal{H}$  величини резонансних енергій всіх трьох КСС зростають, причому наближаючись до околу величини напруженості магнітного поля  $\mathcal{H} = 14$  Тл резонансні енергії  $E_1$  і  $E_2$ , утворюють своєрідний антикросінг, пов'язаний з проаналізованою раніше зміною локалізації електрона в першому КСС, тобто

його переміщенням з другої ями активної зони в першу. Ця обставина ще більш яскраво проявляється на перетині польових залежностей резонансних ширин  $\Gamma_1(\mathcal{H})$  і  $\Gamma_2(\mathcal{H})$  при певній величині напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$ .

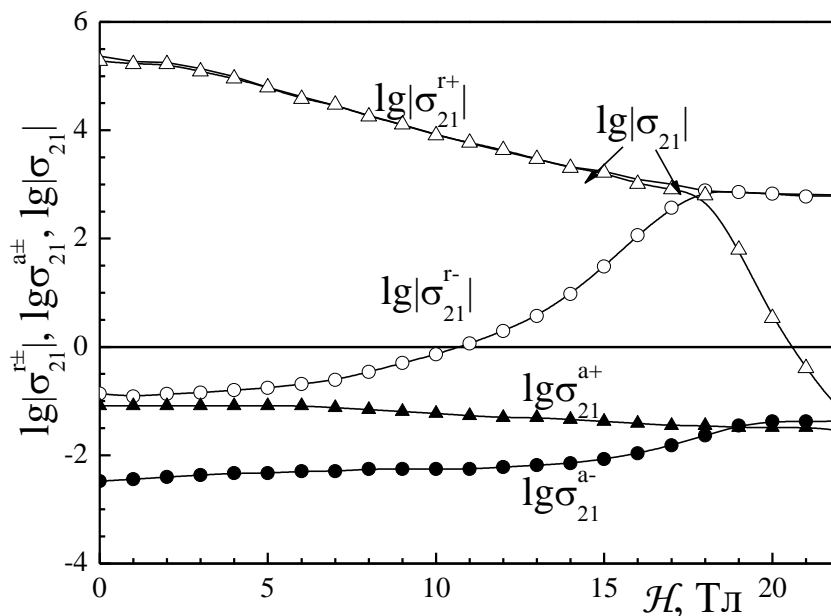
На рис. 2.5 приведено розраховані залежності енергій випромінювання  $\Omega_{21}$  та поглинання  $\Omega_{32}$  електромагнітного поля від величини напруженості магнітного поля у широкому діапазоні (0-22Тл). Там же приведені експериментальні і теоретичні залежності від напруженості магнітного поля енергії лазерного випромінювання ( $\Omega_{21}$ ), отримані в роботі [43]. З рис. 2.5 видно, що зі збільшенням напруженості магнітного поля у межах (0÷8Тл), розрахована у розвинутій теорії величина енергії електромагнітного випромінювання, у відповідності з експериментом [118], зростає, тоді як теоретичні розрахунки, виконані у цитованій роботі, приводили до оберненого напрямку зміщення максимуму спектру випромінювання. Теоретично розрахована середня величина енергії випромінювання ( $\Omega_{21} \approx 125$  меВ) в цьому інтервалі напруженостей магнітного поля з точністю не гірше 6% корелює з експериментально отриманим значенням ( $\Omega_{21}^{\text{exp}} \approx 133$  меВ).



**Рис. 2.5.** Залежності від напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  : в побудованій теорії (енергії випромінювання  $\Omega_{21}$  – 1, енергії поглинання  $\Omega_{23}$  – 2), в експерименті – 3 та теорії – 4 з роботи [43]

Розраховані залежності активної динамічної провідності  $\sigma_{21}$  та її парціальних складових  $\sigma_{21}^{a\pm}$  у залежності від напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  приведено на рис. 2.6.

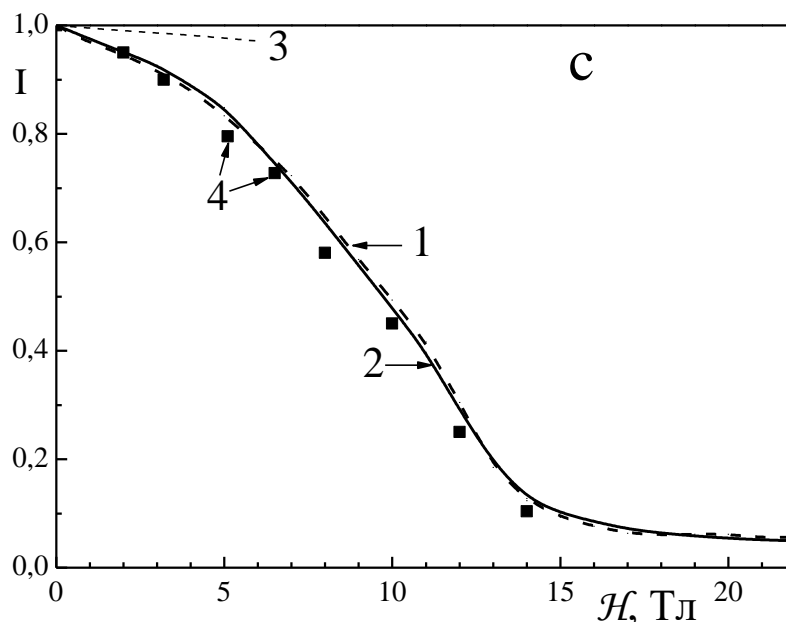
З рис. 2.6 видно, що в усьому інтервалі зміни  $\mathcal{H}$  величини провідностей ( $\sigma_{21}^{a\pm}$ ), що формуються в процесах поглинання енергії електромагнітного поля  $\Omega_{21}$  (навіть близькою до  $\Omega_{32}$ ), дуже малі, а величини  $\sigma_{21}^{r\pm}$ , що формуються у процесах з випромінюванням електромагнітного поля – сильно залежать від напруженості магнітного поля.



**Рис. 2.6.** Залежності від напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  логарифмів величин повної ( $\sigma_{21}$ ) та парціальних складових ( $\sigma_{21}^{a\pm}$ ,  $\sigma_{21}^{r\pm}$ ) провідностей в одиницях  $\sigma_0=1\text{См/см}$

Зі збільшенням напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  початкова значна величина негативної парціальної складової динамічної провідності в прямому напрямку  $|\sigma^+(E_2, \Omega_{21}, \mathcal{H})|$  зменшується, а мала провідність  $|\sigma^-(E_2, \Omega_{21}, \mathcal{H})|$  у зворотному напрямку – збільшується. Тому зі збільшенням напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  приблизно до 16 Тл повна величина провідності

$\sigma(E_2, \Omega_{21}, \mathcal{H})$  формується прямим електронним потоком; в інтервалі 16 Тл-19 Тл – парціальні складові провідності в різні боки РТС є співмірними між собою, а при  $\mathcal{H} \geq 19$  Тл переважає провідність, що формується потоком у зворотному напрямі до початкового. Таким чином, при досягненні напруженості магнітного поля порядку 16 Тл відбувається вирівнювання електронних потоків у обидві сторони активної зони кожного каскаду, внаслідок чого робота ККЛ припиняється, що і спостерігалось експериментально [43].



**Рис. 2.7.** Залежності від напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$ : відносної інтегральної інтенсивності випромінювання (в побудованій теорії: 1 – на основі апроксимації ефективного потенціалу, 2 – точний розв’язок; в теорії – 3 та експерименті – 4 з роботи [43])

На основі розвинутої у попередніх параграфах теорії активної динамічної провідності з використанням розв’язків повного рівняння Шредінгера у відкритих моделях: а) активної зони з апроксимацією потенціальної енергії магнітного та електричного полів ефективним потенціалом та б) повного каскаду з точними потенціальними енергіями обох постійних полів виконувався розрахунок

динамічної провідності та її парціальних складових, а також відносної інтегральної інтенсивності лазерного випромінювання, сформованого квантовими випромінювальними переходами між двома нижніми КСС у залежності від напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$ . При цьому також розраховувалася аналогічна польова залежність частоти лазерного випромінювання електромагнітного поля. Результати цих розрахунків представлено на рис. 2.7. З рис. 2.7 видно, що відносна інтегральна інтенсивність випромінювання, розрахована за запропонованою теорією (криві 1 та 2), на відміну від розрахованої в роботі [118] (крива 3), задовільно узгоджується з експериментом (крива 4) у всьому інтервалі (0-14 Тл) зміни напруженості магнітного поля.

Зауважимо, що як видно з рис. 2.7, результати розрахунку залежностей відносної інтегральної інтенсивності лазерного випромінювання та частоти випромінювання електромагнітного поля від напруженості магнітного поля, які були виконані в двох відкритих моделях РТС: активної зони та повного каскаду, добре корелюють між собою та з експериментальними результатами [118]. Проте застосування моделі повного каскаду має перевагу в тому, що дозволяє більш адекватно описати процеси, які приводять до зменшення інтегральної інтенсивності випромінювання, розраховуючи функцію просторового розподілу  $\rho_{n=1,2}(z)$  для робочих КСС електрона, а також, не зважаючи на хороше узгодження в розрахунках спектрів електрона, дає змогу більш наближено до експерименту розрахувати часи життя електрона в робочих КСС.

## РОЗДІЛ 3

# ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ В ЗАДАЧАХ АДСОРБЦІЇ ЗІ ЗВОРОТНІМИ ВПЛИВАМИ В НЕОДНОРІДНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

### 3.1. Огляд досліджень

Експериментальне та теоретичне дослідження адсорбції кількох газів через нанопористу тверду речовину та миттєвого (поза рівноважного) розподілу адсорбованих фаз є особливо важливим у багатьох областях, таких як гетерогенний каталіз, очищення замкнутої атмосфери, зменшення викидів вихлопних газів, що сприяють до глобального потепління тощо. [44]. Якість математичних моделей складних адсорбційних процесів для сучасних кіберфізичних систем поглинання газоподібних викидів в атмосферу з урахуванням багатьох нанофізичних факторів зворотного зв'язку, що обмежують кінетику адсорбції в нанопорах, та високоефективних методів побудови рішень на основі таких моделей [визначає ефективність [45].

На сьогодні виконано численні теоретичні та експериментальні дослідження адсорбції в нанопористих середовищах, зокрема, щодо удосконалення їхніх математичних моделей з урахуванням впливу різних обмежувальних факторів внутрішньої кінетики адсорбції у нанопористих середовищах [45–58]. Однак через складність процесів та недосконалість підходів їх моделювання ці дослідження більше обмежені інтегральним рівнем без урахування макро- і взаємодій, спрощеним емпіричним описом механізмів адсорбційної рівноваги, неоднорідностей середовищ та ін. Такі моделі звужують можливість моделювання, не забезпечують цілісності та повноти уявлень про внутрішню кінетику нанопроцесів, достатнього врахування низки визначальних факторів, зокрема, нелінійної взаємодії у середовищах мікропотоків у нанопорах частинок. Відсутні строгі математичні моделі, які б у повній мірі враховували обмежувальні фізичні фактори зворотнього зв'язку

наноадсорбції та неоднорідності середовищ, а також високопродуктивних методів їх реалізації.

У продовження досліджень [48–68] у цьому розділі обґрунтовано та розроблено високопродуктивні методи математичного моделювання адсорбції газів в неоднорідних багатоскладових середовищах на основі нелінійної ізотерми Ленгмюра, яка найповніше описує фактори зворотної взаємодії та механізми адсорбційної рівноваги на поверхні нанопор і може бути ефективно розвинута для опису рівноваги різних реальних високотехнологічних адсорбційних кіберфізичних наноадсорбційних систем. Для моделювання складного адсорбційного переносу в неоднорідних середовищах використано високопродуктивні методи операційного числення Гевісайда та матриць впливу Коші. Це надало змогу отримати високошвидкісні аналітичні розв'язки системи лінеаризованих моделей, що підвищує якість розпаралелювання обчислень з орієнтацією на архітектури сучасних обчислювальних систем багатоядерних комп'ютерів.

### **3.2. Основні підходи розробки математичних моделей адсорбції**

На основі аналізу різних підходів моделювання можна виділити і класифікувати такі основні підходи розробки математичних моделей складних процесів адсорбції з використанням рівнянь математичної фізики [44, 46, 48, 50, 53, 55, 60, 63]:

1. Моделі адсорбції на основі концепції континуальності пористого середовища (КПС).
2. Дворівневі моделі адсорбції в середовищі пористих частинок на основі взаємодій двох просторів: міжчастинкового та внутрічастинкового просторів.
3. Моделі компетитивної адсорбції та дифузії на основі КПС.
4. Дворівневі моделі компетитивної адсорбції (змагання) на основі взаємодій interparticle space і intraparticle space.



5. Моделі адсорбції, розвинуті на основі п. 1–4 для випадків неоднорідних і багатоскладових нанопористих середовищ різної конструкції і розмірності.

Модель адсорбції на основі КПС ґрунтується на системі балансових рівнянь в частинних похідних [4, 10]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta (c - c_{eq}(a)). \quad (3.2)$$

Рівняння ((3.1) описує загальний матеріальний баланс адсорбції та дифузії на макрорівні, рівняння, (3.3) – нелінійне рівняння кінетики адсорбційного переносу в нанопорах частинок середовища. Фазовий перехід адсорбтиву із газового потоку в нанопори частинок має рівноважний характер і визначається нелінійною функцією адсорбційної рівноваги Ленгм'юра [53, 54]. Тут  $c$ ,  $a$  – концентрації адсорбтиву в міжчастинковому просторі (interparticle space) та внутрічастинковому просторі (intraparticle space),  $\beta$  – коефіцієнт масопереносу,  $v$  – швидкість руху газового потоку,  $a_{ful}$  – гранична величина адсорбції,  $b$  – константа рівноваги,  $D_{inter}$  коефіцієнт дифузії в міжчастинковому просторі.  $c_{eq}(a) = \frac{1}{b} \frac{a}{a_{full} - a}$  – функція рівноваги Ленгм'юра, що встановлює зв'язок між рівноважною концентрацією  $c_{eq}$  з величиною адсорбції  $a$ .

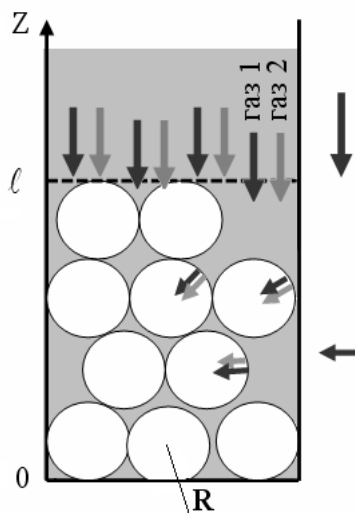
Дворівневі моделі компетитивної адсорбції характеризуються описом адсорбції у двох просторах: міжчастинковому (макрорівень) та внутрічастинковому (мікрорівень) на основі взаємодій макро і мікропотоків [54, 56]. Вхідний потік адсорбату при цьому дифундує одночасно в макропорах міжчастинкового простору і в нанопорах частинок.

У розробленій нами моделі компетитивної дифузії, що є угадальним дворівневою моделі адсорбції, за основу взято фізичну гіпотезу про наявність у системі адсорбційних взаємодій зі зворотними зв'язками, визначеними умовами компетитивної адсорбційної рівноваги між  $N$  компонентів адсорбату (двох і більше газів) та активними центрами адсорбції (АЦА) на поверхнях нанопор частинок. Вказані покомпонентні умови рівноваги визначаються вектор-функцією нелінійної адсорбційної рівноваги типу Ленгмюра, що враховує взаємовпливи усіх складових компонентів адсорбції з урахуванням фізичних припущень [52]. Пропоновану біпористу модель, розроблено на основі підходів [8, 10, 20], визначальних гіпотез і припущень.

1. Компетитивна адсорбція  $N$  газів ( $N \geq 2$ ), зумовлена дисперсійними та електростатичними силами Джона-Ленарда, що включає міжмолекулярну взаємодію та дифузію різних компонентів адсорбату в міжчастинковому просторі і нанопорах сферичних частинок радіусу  $R$ , є рівномірно упакованих в робочій області середовища (рис. 3.1).

2. Компетитивна адсорбція відбувається в АЦА на поверхні нанопор, що адсорбують у різних співвідношеннях молекули різних компонентів адсорбату. Під час еволюції системи до рівноваги мають місце градієнти концентрації різних компонентів адсорбату в макро- і нанопорах, динаміка яких визначається кількісним і якісним складом потоку адсорбату.

3. Має місце взаємовплив ефектів асиметричності. Ці ефекти було виявлено і досліджено для двокомпонентної компетитивної дифузії Петриком М., Фресаром Ж. і Сергієнком І. [58, 59]. Вони пов'язані з дифузією та адсорбцією в нанопорах частинок двох компонентів адсорбтиву з різними властивостями, наприклад  $i$ -го компонента у присутності  $j$ -го і навпаки,  $i \neq j$ . Зокрема, одержано теоретичні та експериментальні результати дослідження окремих несиметричних потоків компетитивної адсорбції типу «бензен у присутності гексану» і навпаки в рівних пропорціях у нанопористих каталізаторах [48].



**Рис. 3.1.** Схема компетитивної адсорбції багатьох газів у середовищі нанопористих частинок

В остаточному вигляді кінетику компетитивної адсорбції  $N$  газів ( $N \geq 2$ ) для нанопористих систем з урахуванням нелінійної функції адсорбційної рівноваги та вказаних фізичних гіпотез можна описати системою нелінійних рівнянь у частинних похідних [11, 20]:

$$\frac{\partial C_j(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{interj}}{l^2} \frac{\partial^2 C_j}{\partial Z^2} - e_{interj} \frac{D_{intraj}}{R^2} \left( \frac{\partial Q_j}{\partial X} \right)_{X=1} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial Q_j(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{intraj}}{R^2} \left( \frac{\partial^2 Q_j}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_j}{\partial X} \right) \quad (3.4)$$

умовами компетитивної адсорбційної рівноваги Ленгмюра на зовнішній поверхні частинки  $X=1$

$$Q_j(t, X=1, Z)|_{X=1} = \frac{K_j C_j(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z) + \dots + K_N C_N(t, Z)}, \quad j = \overline{1, N}, \quad (3.5)$$

Рівняння (3.3) описує масоперенос в міжчастинковому просторі, (3.4) – масоперенос в нанопорах частинки. Взаємозв'язок між масопереносом в нано-

та макропорах визначається компонентом в правій частині (3.3), а також рівнянням рівноваги між концентраціями на поверхні частинки (3.5). Тут  $c_j, q_j, j = \overline{1, N}$  – поточні значення концентрації компонентів адсорбтиву в міжчастинковому та внутрічастинковому просторах,  $c_{\infty j}, q_{\infty j}$  – відповідні їм рівноважні значення концентрацій,  $C_j = c_j / c_{\infty j}, Q_j = q_j / q_{\infty j}, N$  – сумарна кількість адсорбованих компонентів,  $\tilde{K}_j = q_{\infty j} / c_{\infty j}$  – константа адсорбції  $j$ -го компоненту,  $K_j = 1 / \tilde{K}_j, j = \overline{1, N}, \varepsilon_{\text{inter}}$  – макропористість середовища,  $D_{\text{intra}}$  – коефіцієнт дифузії в нанопорах,  $e_{\text{inter}}$  – коефіцієнт впливу внутрішнього-частинкового переносу на міжчастинковий.

При  $n=1$  (3.3), (3.4) є основою моделі монокомпонентної адсорбції. Долучивши до системи (3.3), (3.4) рівняння теплового балансу та відповідні початкові і крайові умови, а також замінивши рівняння рівноваги (3.5) на узагальнені рівняння неізотермічні рівноваги типу Ленгмюра

$$Q_j(t, X=1, Z) = \frac{K_j(T) C_j(t, Z)}{1 + \sum_{s=1}^N K_s(T) C_s(t, Z)}, \quad K_j(T) = k_{0j} \exp\left(-\frac{\Delta H_j}{R_g T}\right), \quad j = \overline{1, N}, \quad (3.6)$$

отримаємо на основі п.4 моделі відповідні їм неізотермічні моделі. Тут  $k_{0j}$  – емпірична постійна складова коефіцієнта адсорбції  $j$ -го компонента,  $T$  – температура потоку,  $\Delta H_j, R_g$  – енергія активації та універсальна газова стала відповідно.

Підхід до декомпозиція нелінійної системи (3.3)–(3.5). Шляхом розвинення нелінійного виразу правих частин (3.5), що представляють функції багатокомпонентної компетитивної адсорбційної рівноваги Ленгмюра для  $j$ -го компонента адсорбату, в ряд Маклорена в околі точки нульових концентрацій усіх компонентів адсорбату  $C_j, j = \overline{1, N}$ , обмежуючись другим порядком точності, приведемо умови рівноваги (3.5) до вигляду [54]:

$$Q_j(t, X=l, Z)|_{X=l} = K_j C_j(t, Z) - K_l^2 \sum_{j_l=1}^N \frac{K_{j_l} K_j}{K_l^2} C_{j_l}(t, Z) C_j(t, Z), \quad j = \overline{1, N} \quad (3.7)$$

За припущення, що  $K_1 = \max \{K_j, K_j < 1\}_{j=1}^N$  та визначивши  $\varepsilon = K_1^2 \ll 1$  як малий параметр, розв'язки нелінійних крайових задач на основі системи рівнянь (3.3), (3.5) з урахуванням (3.7) знаходитимемо у вигляді асимптотичних сум [52, 53]:

$$C_j(t, Z) = C_{j_0}(t, Z) + \varepsilon C_{j_1}(t, Z) + \varepsilon^2 C_{j_2}(t, Z) + \dots,$$

$$Q_j(t, X, Z) = Q_{j_0}(t, X, Z) + \varepsilon Q_{j_1}(t, X, Z) + \varepsilon^2 Q_{j_2}(t, X, Z) + \dots, \quad j = \overline{1, N}. \quad (3.8)$$

В працях нами виконані декомпозиції низки нелінійних моделей адсорбції, розглядуваних на основі вказаної класифікації та отримані точні аналітичні розв'язки лінеаризованих моделей [58–59]. Це є нові моделі у порівнянні з відомими у світовій літературі моделями [48–50], які більше є моделями типу «чорного ящика» і в основному орієнтовані на повільний чисельний наближений розрахунок, що важко піддається розпаралеленню обчислень.

### 3.3. Нелінійна модель адсорбції в обмеженому нанопористому середовищі

Модель ґрунтується на системі балансових рівнянь в частинних похідних (3.1), (3.2). Розклавши нелінійну функцію рівноваги Ленгмюра  $c_{eq}(a)$  з рівняння (3.2) у ряд Тейлора та обмежившись членами не вище другого порядку, отримаємо новий вигляд адсорбційної рівноваги:

$$c_{eq}(a) = \gamma a + \varepsilon a^2, \quad (3.9)$$

де  $\gamma = 1 / (ba_{ful})$  – константа адсорбції, що описує лінійну складову адсорбційної рівноваги (згідно закону Генрі),  $\varepsilon = 1 / (ba_{ful}^2) < 1$  – малий параметр.

З урахуванням наведених припущень, кінетика адсорбції та дифузії в напівобмеженому однорідному нанопористому середовищі опишеться системою диференціальних рівнянь в частинних похідних [47, 48, 54]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(\gamma a + \varepsilon a^2), \quad (3.11)$$

$$c(t, z)|_{t=0} = C_s, \quad a(t, z)|_{t=0} = a_s \quad (3.12)$$

$$c(t, z)|_{z=0} = \omega_0(t) = \omega_0 \quad \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{z=\infty} = 0. \quad (3.13)$$

з початковими умови та крайовими умови.

Декомпозиція нелінійної моделі та побудови розв'язку лінеаризованої системи крайових задач. Задача (3.10)–(3.13) є змішаною крайовою задачею для нелінійної системи диференціальних рівнянь другого порядку з частинними похідними параболічного типу. Розв'язок задачі (3.3)–(3.6) шукатимемо у вигляді асимптотичних сум [63]

$$\begin{aligned} c(t, z) &= c_0(t, z) + \varepsilon c_1(t, z) + \varepsilon^2 c_2(t, z) + \dots, \\ a(t, z) &= a_0(t, z) + \varepsilon a_1(t, z) + \varepsilon^2 a_2(t, z) + \dots \end{aligned} \quad (3.14)$$

В результаті підстановки асимптотичних сум (14) вихідна нелінійна крайова задача (3.10)–(3.14) розпаралелюється на два типи лінеаризованих задач:

**Задача  $A_0$**  (нульове наближення з початковими та крайовими умовами вихідної задачі): Знайти обмежений в області  $D = \{(t, z): t > 0, z \in (0, \infty)\}$  розв'язок системи рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} + \frac{\partial a_0}{\partial t} + v \frac{\partial c_0}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial a_0}{\partial t} = \beta(c_0 - \gamma a_0), \quad (3.16)$$

за початковими умовами

$$c_0(t, z)|_{t=0} = C_s, \quad a_0(t, z)|_{t=0} = a_s \quad (3.17)$$

та крайовими умовами

$$c_0(t, z)|_{z=0} = \omega_0, \quad \frac{\partial c_0}{\partial z}|_{z=\infty} = 0. \quad (3.18)$$

**Задача  $A_n$ ;  $m = \overline{1, \infty}$**  ( $m$ -не наближення з нульовими початковими умовами і крайовими умовами): побудувати в області  $D$  обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + \frac{\partial a_m}{\partial t} + v \frac{\partial c_m}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_m}{\partial z^2}, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial a_m}{\partial t} = \beta \left( c_m - \gamma a_m - \sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right) \quad (3.20)$$

з нульовими початковими і крайовими умовами.

Задача  $A_0$  є лінійною відносно нульового наближення  $a_0$ , задача  $A_m$ ,  $m = \overline{1, \infty}$  є лінійною відносно  $n$ -го наближення  $a_1$  і нелінійною відносно усіх попередніх  $m-1$  наближень  $a_0, \dots, a_{m-1}$ .

Оскільки внаслідок фізики адсорбційного переносу:

а) функції  $a(t, z)$  і  $c(t, z)$  є неперервними разом із своїми похідними для  $t > 0$ ,

б) для  $\forall t < 0$   $c(t, z) = a(t, z) = 0$ ;

в)  $c(t, z)$  і  $a(t, z)$  зростають не швидше показникової функції, тобто  $\exists$  такі сталі  $M_c > 0$ ,  $M_a > 0$ ,  $S_c \leq 0$  і  $S_a \leq 0$ , що для  $\forall \tau$

$$|c(t, z)| < M_c e^{S_c t}, \quad |a(t, z)| < M_a e^{S_a t},$$

(функції розподілів концентрацій  $c$  і  $a$  є обмеженими), тому задачі  $A_0$  і  $A_m$  природно розв'язувати з допомогою операційним методом Гевісайда з використанням інтегрального перетворення Лапласа по змінній  $t$  [68, 69]

$$L[c(t, z)] \equiv c^*(p, z) = \int_0^\infty c(t, z) e^{-pt} dt, \quad L[a(t, z)] \equiv a^*(p, z) = \int_0^\infty a(t, z) e^{-pt} dt.$$

В зображеннях за Лапласом одержимо задачі  $A_0^*$  і  $A_n^*$ :

Задача  $A_0^*$ : Побудувати обмежений в області  $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$  розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 c_0^*}{dz^2} - v_1 \frac{dc_0^*}{dz} - q^2 c_0^* = -F^*(p), \quad (3.21)$$

$$a_0^*(p, z) = \frac{\beta}{p + \gamma\beta} c^*(p, z) + \frac{a_s}{p + \gamma\beta}, \quad (3.22)$$



з крайовими умовами

$$c_0^* \Big|_{z=0} = \frac{C_s}{p}, \quad \frac{dc_0^*}{dz} \Big|_{z=\infty} = 0. \quad (3.23)$$

$$\text{Тут } v_1 = \frac{v}{D_{inter}}, \quad q^2(p) = p(p + \gamma\beta + \beta) / (D_{inter}(p + \gamma\beta)), \quad F^* = \frac{C_s}{D_{inter}} + \frac{a_s}{D_{inter}} \frac{\beta\gamma}{p + \gamma\beta}$$

$$c_0^*(p, z) = \int_0^\infty c_0(t, z) e^{-pt} dt, \quad a_0^*(p, z) = \int_0^\infty a_0(t, z) e^{-pt} dt.$$

Фундаментальну систему розв'язків крайової задачі (14)–(16) складають функції  $e^{\left(\frac{v_1}{2} + \zeta(p)\right)z}$ ,  $e^{\left(\frac{v_1}{2} - \zeta(p)\right)z}$ , де  $\zeta(p) = \left(v_1^2 / 4 + q(p)^2\right)^{1/2}$ ,  $\text{Re } \zeta > 0$ . Зафіксувавши гілку  $\text{Re } \zeta(p) > 0$ , будуємо методом функцій Коші [70]

$$C_0^*(p, z) = B e^{\left(\frac{v_1}{2} - \zeta(p)\right)z} + \int_0^\infty E^*(p, z, \xi) \cdot F^*(p, \xi) d\xi, \quad (3.24)$$

де  $E^*(p, z, \xi)$  – функція Коші, яка знаходиться у вигляді

$$E^*(p, x, \xi) = \begin{cases} E^{-*} = D_1 e^{\left(\frac{v_1}{2} + \zeta(p)\right)z} + E_1 e^{\left(\frac{v_1}{2} - \zeta(p)\right)z}, & 0 < z < \xi < \infty, \\ E^{+*} = E_2 e^{\left(\frac{v_1}{2} - \zeta(p)\right)z}, & 0 < \xi < z < \infty, \end{cases}$$

$$\text{задовольняючи умови} \quad \begin{cases} E^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - E^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 0, \\ \frac{d}{dz} E^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d}{dz} E^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = -1 \end{cases} \quad \text{та ліву}$$

однорідну крайову умову (3.18).

Безпосередньо перевіряється, що  $E^*(p, x, \xi)$  має вигляд:

$$E^*(p, z, \xi) = \frac{1}{2\zeta(p)} e^{\frac{1}{2}v_1(z-\xi)} \left( e^{-|z-\xi|\zeta(p)} - e^{-(z-\xi)\zeta(p)} \right). \quad (3.25)$$

В результаті низки обчислень розв'язок задачі  $A_0^*$  (24) зводиться до вигляду:

$$c_0^*(p, z) = \frac{\gamma(C_s + a_s)}{1+\gamma} \frac{1}{p} + \frac{C_s - \gamma a_s}{1+\gamma} \frac{1}{p + \beta(1+\gamma)} + (\omega_0 - C_s) e^{\frac{v_1}{2}z} \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} + \\ + \beta(C_s - \gamma a_s) \frac{1}{p + \beta(1+\gamma)} e^{\frac{v_1}{2}z} \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p}. \quad (3.26)$$

Обчислюючи оригінали за Лапласом у формулі (3.26), отримуємо:

$$c(t, z) = (C_s + a_s) \frac{\gamma}{1+\gamma} L^{-1} \left[ \frac{1}{p} \right] + \frac{C_s - \gamma a_s}{1+\gamma} L^{-1} \left[ \frac{1}{p + \beta(1+\gamma)} \right] + (\omega_0 - C_s) e^{\frac{u_1}{2}z} L^{-1} \left[ \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} \right] + \\ + \beta(C_s - \gamma a_s) L^{-1} \left[ \frac{1}{p + \beta(\gamma+1)} \right] * L^{-1} \left[ \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} \right] e^{\frac{u_1}{2}z}. \quad (3.27)$$

Обчислимо оригінал виразу  $\frac{e^{-\zeta(p)z}}{p}$ :

$$W_c(t, z) \equiv L^{-1} \left[ \frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{2\pi_i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} e^{pt} dp. \quad (3.28)$$

Особливими точками функції  $\frac{e^{-\zeta(p)z}}{p}$  є полюси першого порядку  $p = 0$  і точки

галуження  $p = \infty$  та  $p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[ \beta(\gamma+1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{inter}} \pm \sqrt{\left( \beta(\gamma+1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{inter}} \right)^2 - \beta\gamma \frac{u^2}{D_{inter}}} \right] < 0$ , де

$$\zeta(p) = 0 \text{ або } p^2 + \left( \frac{u^2}{4D_{inter}} + \beta(\gamma+1) \right) p + \frac{u^2}{4D_{inter}} \beta\gamma = 0.$$

Це дозволяє у формулі (3.28) інтегрування на прямій  $\operatorname{Re} p = \sigma_0 > 0$  замінити на інтегрування по уявній осі ( $\operatorname{Re} p = 0$ ) [17, 26]:

$$\begin{aligned} W(t, z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\nu(p)z}}{p} e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{e^{-\zeta(iv)z}}{iv} e^{ivt} d\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\zeta(iv)z}}{iv} e^{ivt} d\nu = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[ \frac{e^{-(\varphi_1(\nu) + i\varphi_2(\nu))z}}{iv} e^{ivt} \right] d\nu + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z} \end{aligned}$$

Після низки перетворень отримуємо оригінал:

$$W_c(t, z) = L^{-1} \left[ \frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} e^{pt} dp = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\varphi_1(\nu)z} \frac{\sin(\nu t - z\varphi_2(\nu)^2)}{\nu} d\nu + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}$$

$$\text{де } \varphi_1(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_1^2(\nu) + \Gamma_2^2(\nu))^{1/2} + \Gamma_1(\nu)}{2} \right]^{1/2}, \quad \varphi_2(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_1^2(\nu) + \Gamma_2^2(\nu))^{1/2} - \Gamma_1(\nu)}{2} \right]^{1/2}$$

$$\Gamma_1(\nu) = \frac{u^2}{4D_{\text{inter}}^2} + \frac{\nu^2 \beta}{D_{\text{inter}}^2 (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)}, \quad \Gamma_2(\nu) = \frac{\nu^3 + \nu \beta^2 (\gamma + 1) \gamma}{D_{\text{inter}} (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)}.$$

Повертаючись у рівностях (3.27), (3.22) до оригіналів, маємо функції

$$\begin{aligned} c_0(t, z) &= \frac{\gamma(C_s + a_s)}{1 + \gamma} + \frac{C_s - \gamma a_s}{1 + \gamma} e^{-\beta(1+\gamma)t} + (\omega_0 - C_s) e^{\frac{1}{2}v_1 z} W_c(t, z) + \\ &\quad + \beta(C_s - \gamma a_s) \int_0^t e^{-\beta(1+\gamma)(t-s)} W_c(s, z) ds \cdot e^{\frac{1}{2}v_1 z}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$a_0(t, z) = a_s e^{-\gamma \beta t} + \beta \int_0^t e^{-\gamma \beta(t-s)} c_0(s, z) ds, \quad (3.30)$$

що є розв'язком задачі  $A_0$ .

**Задача**  $A_m^*$ ,  $m = \overline{1, \infty}$ : побудувати обмежений в області  $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$  розв'язок системи рівнянь в частинних похідних

$$\frac{d^2 c_m^*}{dz^2} - \frac{\nu}{D_{inter}} \frac{dc_m^*}{dz} - \frac{p}{D_{inter}} (C_s^* + a_s^*) = 0, \quad (3.31)$$

$$\beta c_m^* - (p + \gamma\beta) a_m^* = \beta \left( \sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right)^*, \quad (3.32)$$

за нульовими крайовими умовами.

Розв'язком системи рівнянь (3.31), (3.32) є функції [17, 26]:

$$c_m^*(p, z) = \frac{p\beta}{D_{inter}(p + \gamma\beta)} \int_0^\infty E^*(p, z, \xi) \left( \sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right)^* (p, \xi) d\xi, \quad (3.33)$$

$$a_m^*(p, z) = \frac{\beta}{p + \gamma\beta} c_m^*(p, z) - \frac{\beta}{p + \gamma\beta} \left( \sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right)^* (p, z). \quad (3.34)$$

Обчислимо оригінал

$$\begin{aligned} E(t, z, \xi) &= L^{-1} [E^*(p, z, \xi)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} E^*(p, z, \xi) e^{pt} = \\ &= e^{\frac{1}{2}v_1(z-\xi)} [W(t, |z-\xi|) - W(t, z+\xi)] \end{aligned}$$

$$\text{де } W(t, z) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \frac{\varphi_1(\nu) \cos\left(\nu t - \frac{z}{\sqrt{2}} \varphi_2(\nu)\right) + \varphi_2(\nu) \sin\left(\nu t - \frac{z}{\sqrt{2}} \varphi_2(\nu)\right)}{\sqrt{\Gamma_1^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_2^2(\nu)}} e^{-\frac{z}{\sqrt{2}} q_1} d\nu$$

Повертаючись в (3.33), (3.34) до оригіналів, отримуємо функції

$$C_n(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^t \int_0^\infty [E(t-s, z, \xi) - \gamma \beta E_1(t-s, z, \xi)] \sum_{i=0}^{n-1} a_i(s, \xi) a_{n-1-i}(s, \xi) d\xi ds, \quad (3.35)$$

$$a_n(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\gamma \beta(t-s)} [c_n(s, z) - a_0^2(s, z)] ds, n = \overline{1, \infty}, \quad (3.36)$$

які є розв'язком задачі  $A_n; n = \overline{1, \infty}$ .

$$\text{Тут } E_1(t, z, \xi) = \int_0^t e^{-\gamma \beta(t-s)} E(s, z, \xi) ds.$$

### 3.4. Крайова задача адсорбції в напівобмежених неоднорідних багатокomпонентних нанопористих середовищах

Розглядається адсорбційний перенос в напівобмеженому неоднорідному багатоскладовому по координаті  $z$  нанопористому середовищі, сформованого з  $n$  шарів адсорбентів з різними фізико-хімічними характеристиками, де  $n$  довільне число. З метою інтенсифікації переносу може забезпечується своєрідна по черговість двох суміжних нан шарів: одного з достить високою адсорбційної здатність шару, що забезпечується високим рівнем розгалуженості мікро і нанопор та іншого з дещо відносно нижчою адсорбційною здатністю та ін. Математична модель такого переносу може бути описана у вигляді такої нелінійної змішаної крайової задачі: побудувати обмежений в області

$$D_n = \left\{ (t, z) : t > 0, z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k), l_0 \geq 0, l_{n+1} = \infty \right\} \text{ розв'язок системи диференціальних}$$

рівнянь в частинних похідних в матричній формі [44, 60]

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} c_1(t, z) \\ c_2(t, z) \\ \dots \\ c_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a_1(t, z) \\ a_2(t, z) \\ \dots \\ a_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \eta_1 c_1 \\ \eta_2 c_2 \\ \dots \\ \eta_{n+1} c_{n+1} \end{bmatrix} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \begin{bmatrix} D_{inter_1} & 0 & 0 \\ 0 & D_{inter_2} & 0 \\ & & \dots \\ 0 & 0 & D_{inter_{n+1}} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{n+1} \end{bmatrix} \right), \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a_1(t, z) \\ a_2(t, z) \\ \dots \\ a_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 \\ & & \dots \\ 0 & 0 & \beta_{n+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1(t, z) \\ c_2(t, z) \\ \dots \\ c_{n+1}(t, z) \end{bmatrix}_k - \begin{bmatrix} \gamma_1 a_1(t, z) \\ \gamma_2 a_2(t, z) \\ \dots \\ \gamma_{n+1} a_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} + \varepsilon \begin{bmatrix} a_1^2(t, z) \\ a_2^2(t, z) \\ \dots \\ a_{n+1}^2(t, z) \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

за початковими умовами

$$c_k(t, z)|_{t=0} = c_{0_k}(z), \quad a_2(t, z)|_{t=0} = a_{0_k}(z), \quad (3.39)$$

крайовими умовами по геометричній змінній  $z$ :

$$\begin{aligned} (\alpha_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{11}^0) c_1(t, z)|_{z=l_0} &= \omega_0(t), \\ (\alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{22}^{n+1}) c_{n+1}(t, z)|_{z=l_{n+1}} &= \omega_{n+1}(t) \end{aligned}, \quad (3.40)$$

та системою  $n$ - інтерфейсних умов третього роду по змінній  $z$ :

$$\left( \alpha_{j1}^k \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{j1}^k \right) C_k(t, z)|_{z=l_k} = \left( \alpha_{j2}^k \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{j2}^k \right) C_{k+1}(t, z)|_{z=l_k} \quad k = \overline{1, n}. \quad (3.41)$$

Тут  $c_k, a_k$  – концентрації адсорбтиву відповідно в міжчастинковому і внутрічастинковому просторах для  $k$ -го шару адсорбційного середовища  $k = \overline{1, n+1}$ . В загальному випадку коефіцієнти дифузії є залежні від поточних концентрацій. При побудові аналітичного розв'язку прямої неоднорідної початково-крайової задачі (3.37)–(3.41) інтерфесні умови записані і розглядались в узагальненому вигляді (3.41). Для практичних розрахунків умови (3.41) легко трансформуються до вигляду:

$$\left[ C_k(t, z) - C_{k+1}(t, z) \right] \Big|_{z=l_k} = 0; \quad \frac{\partial}{\partial z} \left[ C_k(t, z) - \frac{D_{k+1}}{D_k} C_{k+1}(t, z) \right] \Big|_{z=l_k} = 0 \quad k = \overline{1, n}.$$

Для випадку, що враховує нестационарності масообміну на масообмінних межах (крайових та інтерфейсних  $z = l_{k-1}, k = \overline{1, n+1}$ ) замість умов (3.40), (3.41) можуть бути використані умови типу

$$\left[ (\alpha_{12}^0 + \delta_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{12}^0 + \gamma_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_1(t, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_0(t); \quad \frac{\partial C_{n+1}(t, z)}{\partial t} \Big|_{z=\infty} = 0;$$

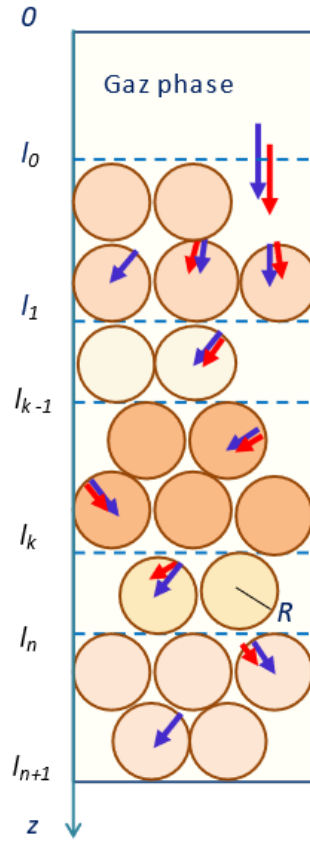
$$\left[ \left[ (\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_k(t, z) - \left[ (\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_{k+1}(t, z) \right] \Big|_{z=l_k} = 0;$$

$k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}.$

Тут  $c_k, a_k$  – концентрації адсорбтиву відповідно в газовій фазі (міжчастинковий простір) та твердій фазі (в нанопорах адсорбенту) для  $k$ -го шару нанопористого середовища,  $\eta_k$  – константа реакції компонента адсорбату для  $k$ -го шару середовища (важливо для агресивних газів),  $k = \overline{1, n+1}$ . У правій частині (3.37) відсутні складові якогось неперервно чи миттєво діючих джерел/стоків маси  $f_k(t, z)$  на кожному  $k$ -го шару по причині їх недоречності у таких процесах. Чисто формальне введення подібних складових в модель не представляє особливих труднощів.

Методологія побудови аналітичного розв'язку. В припущенні, що шукані вектор – функції  $c(t, z), a(t, z)$  є оригіналами за Лапласом, застосуємо до крайової задачі (3.37)–(3.41) інтегральне перетворення Лапласа стосовно часової змінної  $t$  [71]. В результаті отримаємо змішану крайову задачу: побудувати обмежений на множині –

$$I_n = \left\{ z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k), l_0 \geq 0, l_{n+1} = \infty \right\} \text{ розв'язок системи рівнянь:}$$



**Рис. 3.2.** Схематизація адсорбційного переносу в неоднорідному  $n$ -складовому середовищі

$$\frac{d^2 C_k^*}{dz^2} - q_k^2(p) c_k^*(p, z) = -F_k^*(p, z) \quad (3.42)$$

за крайовими умовами

$$\left[ \alpha_{12}^0 \frac{d}{dz} + \delta_{12}^0 \right] c_1^*(p, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_1^*(p), \quad \frac{dc_{n+1}^*(t, z)}{dt} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (3.43)$$

та інтерфейсними умовами по координаті  $z$ :

$$\left[ \left( \alpha_{j1}^k \frac{d}{dz} + \delta_{j1}^k \right) c_k^*(p, z) - \left( \alpha_{j2}^k \frac{d}{dz} + \delta_{j2}^k \right) c_{k+1}^*(p, z) \right] \Big|_{z=l_k} = 0; \quad k = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, 2}. \quad (3.44)$$



$$\text{Тут } F_k^*(p, z) = \frac{1}{D_{inter_k}} [C_{o_k}(z) + \frac{\beta_k \gamma_k}{p + \beta_k \gamma_k} a_{0_k}(z)], \quad \omega_1^*(p) = \omega_0^*(p),$$

$$q_k^2(p) = \frac{1}{D_{inter_k}(p + \beta_k \gamma_k)} \left[ p^2 + p(\beta_k(1 + \gamma_k) + \beta_k \gamma_k \eta_k) \right]; \quad k = \overline{1, n}; j, m = \overline{1, 2}.$$

При цьому

$$a_k^*(p, z) = \frac{a_{0_k}(z)}{p + \beta_k \gamma_k} + \frac{\beta_k}{p + \beta_k \gamma_k} c_k^*(p, z), \quad k = \overline{1, n+1}. \quad (3.45)$$

Зафіксувавши гілку  $\operatorname{Re} q_k(p) > 0$ , розв'язок неоднорідної крайової задачі (6)–(8) побудуємо методом функцій Коші [60, 61]:

$$c_k^*(p, z) = A_k \cdot chq_k z + B_k \cdot shq_k z + \int_{l_{k-1}}^{l_k} E_k^*(p, z, \xi) F_k^*(p, \xi) d\xi; k = \overline{1, n}, \quad (3.46)$$

$$c_{n+1}^*(p, z) = B_{n+1} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} + \int_{l_n}^{\infty} E_{n+1}^*(p, z, \xi) F_{n+1}^*(p, \xi) d\xi, \quad (3.47)$$

де  $E_k^*(p, z, \xi), k = \overline{1, n+1}$  – функції Коші, що задовольняють умови:

$$\begin{cases} E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 0 \\ \frac{d}{dz} E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d}{dz} E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = -1 \end{cases}. \quad (3.48)$$

Функції Коші  $E_k^*(p, z, \xi), k = \overline{1, n}$  шукаємо у вигляді

$$E_k^*(p, z, \xi) = \begin{cases} E_k^{-*} = D_{1_k} chq_k z + E_{1_k} shq_k z; l_k < z < \xi < l_{k+1} \\ E_k^{+*} = D_{2_k} chq_k z + E_{2_k} shq_k z; l_k < \xi < z < l_{k+1} \end{cases}, \quad (3.49)$$

що задовольняють ще додаткові однорідні умови

$$\left( \alpha_{12}^k \frac{d}{dz} + \delta_{12}^k \right) E_k^{-*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0 \text{ (перша права умова } k\text{-}l\text{-го інтерфейсу на межі } z=l_{k-1}+0) \quad (3.50)$$

$$\left( \alpha_{11}^k \frac{d}{dz} + \delta_{11}^k \right) E_k^{+*} \Big|_{z=l_k-0} = 0 \text{ (перша ліва умова } k\text{-го інтерфейсу на межі } z=l_k-0, k=\overline{1, n}). \quad (3.51)$$

При  $k=1$  умова (3.50) визначатиметься першою лівою крайовою умовою на межі  $z=l_0$ .

Функцію Коші  $E_{n+1}^*(p, z, \xi)$  шукаємо у вигляді

$$E_{n+1}^*(p, z, \xi) = \begin{cases} E_{n+1}^{-*} = D_{1_{n+1}} ch q_{n+1} z + E_{1_{n+1}} sh q_{n+1} z; l_n < z < \xi < \infty \\ E_{n+1}^{+*} = E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(z-l_n)}; l_n < \xi < z < \infty \end{cases}, \quad (3.52)$$

що задовольняє ще додаткову однорідну умову

$$\left( \alpha_{12}^n \frac{d}{dz} + \delta_{12}^n \right) E_{n+1}^{-*} \Big|_{z=l_n+0} = 0 \text{ (перша права умова } n\text{-го інтерфейсу – на межі } z=l_n+0). \quad (3.53)$$

Побудуємо функції Коші  $E_k^*(p, z, \xi); k=\overline{1, n}$ . З умов (3.48) отримаємо алгебраїчну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} (D_{2_k} - D_{1_k}) ch q_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) sh q_k \xi &= 0; \\ (D_{2_k} - D_{1_k}) sh q_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) ch q_k \xi &= -\frac{1}{q_k}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Звідси одержуємо співвідношення

$$(D_{2_k} - D_{1_k}) = \frac{1}{q_k} sh q_k \xi, \quad (E_{2_k} - E_{1_k}) = -\frac{1}{q_k} ch q_k \xi.$$

З інтерфейсних умов (3.51) маємо рівності:

$$\begin{aligned} \left( \alpha_{12}^k \frac{d}{dz} + \delta_{12}^k \right) E_k^{-*} \Big|_{z=l_{k-1}} &= D_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) + E_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) = 0, \\ \left( \alpha_{11}^k \frac{d}{dz} + \delta_{11}^k \right) E_k^{+*} \Big|_{z=l_k} &= D_{2_k} \cdot V_{11}^{k1}(q_k l_k) + E_{2_k} \cdot V_{11}^{k2}(q_k l_k) = 0. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Підставивши в перше рівняння (3.55)  $D_{2_k}, E_{2_k}$ , отримуємо систему рівнянь для визначення коефіцієнтів  $D_{1_k}, E_{1_k}$ :

$$D_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_k) + E_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) = 0, \quad (3.56)$$

$$D_{1_k} \cdot V_{11}^{k1}(q_k l_k) + E_{1_k} \cdot V_{11}^{k2}(q_k l_k) = \frac{1}{q_k} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi),$$

звідки знаходимо:

$$D_{1_k} = -\frac{\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi)}{q_k \cdot \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}), \quad E_{1_k} = \frac{\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1})}{q_k \cdot \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)}.$$

Цим функція Коші  $E_k^*(p, z, \xi); k = \overline{1, n}$  визначена і внаслідок симетрії відносно діагоналі  $z = \xi$  має таку структуру:

$$E_k^*(p, z, \xi) = -\frac{I}{q_k \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \begin{cases} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi), & l_{k-1} < z < \xi < l_k \\ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z), & l_{k-1} < \xi < z < l_k \end{cases}. \quad (3.57)$$

Тут

$$V_{ij}^{k1}(q_s l_k) = (\alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \delta_{ij}^k) ch(q_s z) \Big|_{z=l_k} = \alpha_{ij}^k q_s sh(q_s l_k) + \delta_{ij}^k ch(q_s l_k),$$

$$V_{ij}^{k2}(q_s l_k) = (\alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \delta_{ij}^k) sh(q_s z) \Big|_{z=l_k} = \alpha_{ij}^k q_s ch(q_s l_k) + \delta_{ij}^k sh(q_s l_k)$$

$$\Phi_{ij}^k(q_s l_k, q_s z) = V_{ij}^{k2}(q_s l_k) ch(q_s z) - V_{ij}^{k1}(q_s l_k) sh(q_s z)$$

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = \begin{cases} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) V_{11}^{k2}(q_k l_k) - V_{11}^{k1}(q_k l_k) V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}); & k = \overline{2, n} \\ \Delta_{11}^1(q_1 l_0, q_1 l_1); & k = 1 \end{cases}$$

$$\Delta_{j1}^1(q_1 l_0, q_1 l_1) = V_{11}^{01}(q_1 l_0) \cdot V_{j1}^{12}(q_1 l_1) - V_{j1}^{11}(q_1 l_1) \cdot V_{11}^{0,2}(q_1 l_0)$$

Обчислимо вираз для функції Коші  $E_{n+1}^*(p, z, \xi)$ . З умови (3.53) знаходимо додаткове рівняння

$$\left( \alpha_{12}^n \frac{d}{dz} + \delta_{12}^n \right) E_{n+1}^*(p, z, \xi) \Big|_{z=l_n} = D_{1_{n+1}} V_{12}^{n1}(q_{n+1} l_n) + E_{1_{n+1}} V_{12}^{n2}(q_{n+1} l_n) = 0. \quad (3.58)$$

Внаслідок умов (3.40) маємо алгебраїчну систему:

$$\left[ E_{n+1}^{+*}(p, z, \xi) - E_{n+1}^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=\xi} = E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)} - (D_{1_{n+1}} ch(q_{n+1} \xi) + E_{1_{n+1}} sh(q_{n+1} \xi)) = 0 \quad (3.59)$$

$$\frac{d}{dz} \left[ E_{n+1}^{+*}(p, z, \xi) - E_{n+1}^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=\xi} = -q_{n+1} E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)} - q_{n+1} (D_{1_{n+1}} sh(q_{n+1} \xi) + E_{1_{n+1}} ch(q_{n+1} \xi)) = -1.$$

Із системи (3.59) отримуємо:

$$D_{1_{n+1}} = -\frac{sh q_{n+1} \xi}{q_{n+1}} + E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1} l_n}, \quad E_{1_{n+1}} = \frac{ch q_{n+1} \xi}{q_{n+1}} - E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1} l_n}.$$

Підставивши  $D_{l_{n+1}}, E_{l_{n+1}}$  в (3.58), одержуємо:

$$E_{2_{n+1}} = -\frac{1}{q_{n+1}} \frac{\Phi_{12}^n(q_{n+1}l_n, q_{n+1}\xi) e^{-q_{n+1}l_n}}{V_{12}^{n1}(q_{n+1}\xi) - V_{12}^{n2}(q_{n+1}\xi)} = \frac{\Phi_{12}^n(q_{n+1}l_n, q_{n+1}\xi)}{q_{n+1}(\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n)}.$$

Тут  $V_{12}^{n1}(q_{n+1}\xi) - V_{12}^{n2}(q_{n+1}\xi) = (\delta_{12}^n - \alpha_{12}^n q_{n+1})(chq_{n+1}l_n - shq_{n+1}l_n) = (\delta_{12}^n - \alpha_{12}^n q_{n+1})e^{-q_{n+1}l_n}$ .

Цим функція Коші  $E_{n+1}^*(p, z, \xi)$  визначена і внаслідок симетрії відносно діагоналі  $z = \xi$  має таку структуру:

$$E_{n+1}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_{n+1}(\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n)} \begin{cases} \Phi_{12}^n(q_{n+1}l_n, q_{n+1}z) \cdot e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}, l_n < z < \xi < \infty \\ \Phi_{12}^n(q_{n+1}l_n, q_{n+1}\xi) \cdot e^{-q_{n+1}(z - l_n)}, l_n < \xi < z < \infty \end{cases} \quad (3.60)$$

При відомих функціях Коші  $E_k^*(p, z, \xi)$  крайова умова в точці  $z = l_0$  та інтерфейсні умови (3.44) для визначення коефіцієнтів  $A_k, B_k (k = \overline{1, n})$  та  $B_{n+1}$  у структурах (3.46)–(3.47) загального розв'язку крайової задачі (3.42)–(3.44), дають алгебраїчну систему з  $(2n+1)$  рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{12}^{01}(q_1 l_0) A_1 + V_{12}^{02}(q_1 l_0) B_1 = \omega_1^*(p) \\ V_{11}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{11}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{12}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{12}^{12}(q_2 l_1) B_2 = \omega_{l_1} \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{21}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{22}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{22}^{12}(q_2 l_1) B_2 = G_1^* \\ V_{11}^{21}(q_2 l_2) A_2 + V_{11}^{22}(q_2 l_2) B_2 - V_{12}^{21}(q_3 l_2) A_3 - V_{12}^{22}(q_3 l_2) B_3 = 0 \\ V_{21}^{21}(q_2 l_2) A_2 + V_{21}^{22}(q_2 l_2) B_2 - V_{22}^{21}(q_2 l_2) A_3 - V_{22}^{22}(q_2 l_2) B_3 = G_2^* \\ \text{-----} \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{11}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{12}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{12}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = 0 \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{21}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{22}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{22}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = G_k^* \\ V_{11}^{k+1,1}(q_{k+1} l_{k+1}) A_{k+1} + V_{11}^{k+1,2}(q_{k+1} l_{k+1}) B_{k+1} - V_{12}^{k+1,1}(q_{k+2} l_{k+1}) A_{k+2} - V_{12}^{k+1,2}(q_{k+2} l_{k+1}) B_{k+2} = 0 \\ V_{21}^{k+1,1}(q_{k+1} l_{k+1}) A_{k+1} + V_{21}^{k+1,2}(q_{k+1} l_{k+1}) B_{k+1} - V_{22}^{k+1,1}(q_{k+2} l_{k+1}) A_{k+2} - V_{22}^{k+1,2}(q_{k+2} l_{k+1}) B_{k+2} = G_{k+1}^* \\ \text{-----} \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{11}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}) B_{n+1} = 0 \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{21}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{22}^n - \bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1}) B_{n+1} = G_n^* \end{array} \right. \quad (3.61)$$

Функції  $G_k^*$ , що беруть участь в системі (3.61), обчислюються за формулою

$$G_k^* = \int_{l_k}^{l_{k+1}} \left( \alpha_{22}^k \frac{d}{dz} + \delta_{22}^k \right) E_{k+1}^{*-}(p, z, \xi) \Big|_{z=l_k} F_{k+1}^*(p, \xi) d\xi - \int_{l_{k-1}}^{l_k} \left( \alpha_{21}^k \frac{d}{dz} + \delta_{21}^k \right) E_k^{+*}(p, z, \xi) \Big|_{z=l_k} F_k^*(p, \xi) d\xi;$$

$$k = \overline{1, n}, \quad l_{n+1} = \infty$$

і мають вигляд:

$$G_k^* = h_{2_k} \int_{l_k}^{l_{k+1}} \frac{\Phi_{11}^{k+1}(q_{k+1} l_{k+1}, q_{k+1} \xi)}{\Delta_{11}(q_{k+1} l_k, q_{k+1} l_{k+1})} F_{k+1}^*(p, \xi) d\xi - h_{1_k} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \frac{\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi)}{\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} F_k^*(p, \xi) d\xi,$$

$$k = \overline{1, n-1}$$

$$G_n^* = h_{2_n} \int_{l_n}^{\infty} \frac{e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}}{\delta_{12}^n - \alpha_{12}^n q_{n+1}} F_{n+1}^*(p, \xi) d\xi - h_{1_n} \int_{l_{n-1}}^{l_n} \frac{\Phi_{12}^{n-1}(q_n l_{n-1}, q_n \xi)}{\Delta_{11}(q_n l_{n-1}, q_n l_n)} F_n^*(p, \xi) d\xi.$$

Тут  $h_{j_k} = \alpha_{2j}^k \delta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \delta_{2j}^k$ ;  $k = \overline{1, n}$ ,  $j = \overline{1, 2}$ .

Запишемо матрицю коефіцієнтів системи (3.61)

$$M = \begin{pmatrix} \overset{1}{A_1} \overset{2}{B_1} \overset{3}{A_2} \overset{4}{B_2} \overset{5}{A_3} \overset{6}{B_3} \dots \overset{2k-1}{A_{k-1}} \overset{2k}{B_{k-1}} \overset{2k-1}{A_k} \overset{2k}{B_k} \overset{2k+1}{A_{k+1}} \overset{2k+2}{B_{k+1}} & \dots & \overset{2n-1}{A_n} \overset{2n}{B_n} \overset{2n+1}{B_{n+1}} \\ V_{12}^{01} V_{12}^{02} & & \\ V_{11}^{11} V_{11}^{12} - V_{12}^{11} V_{12}^{12} & & \\ V_{21}^{11} V_{21}^{12} - V_{22}^{11} V_{22}^{12} & & \\ & V_{11}^{21} V_{11}^{22} - V_{12}^{21} V_{12}^{22} & 0 \\ & V_{21}^{21} V_{21}^{22} - V_{22}^{21} V_{22}^{22} & \\ & V_{11}^{31} V_{11}^{32} \dots & \\ & V_{21}^{31} V_{21}^{32} \dots & \\ & \dots & \\ & \dots - V_{12}^{k-2,j} - V_{12}^{k-2,2} & \\ & \dots - V_{22}^{k-2,j} - V_{22}^{k-2,2} & \\ & V_{11}^{k-1,j} V_{11}^{k-1,2} - V_{12}^{k-1,j} V_{12}^{k-1,2} & \\ & V_{21}^{k-1,j} V_{21}^{k-1,2} - V_{22}^{k-1,j} V_{22}^{k-1,2} & \\ & & V_{11}^{k1} V_{11}^{k2} - V_{12}^{k1} V_{12}^{k2} \\ & & V_{21}^{k1} V_{21}^{k2} - V_{22}^{k1} V_{22}^{k2} \\ 0 & & V_{11}^{k+1,j} V_{11}^{k+1,2} - V_{12}^{k+1,j} V_{12}^{k+1,2} \\ & & V_{21}^{k+1,j} V_{21}^{k+1,2} - V_{22}^{k+1,j} V_{22}^{k+1,2} \\ & & V_{11}^{k+2,j} V_{11}^{k+2,2} - V_{12}^{k+2,j} V_{12}^{k+2,2} \dots \\ & & V_{21}^{k+2,j} V_{21}^{k+2,2} - V_{22}^{k+2,j} V_{22}^{k+2,2} \dots \\ & & \dots \\ & & \dots - V_{12}^{n-1,j} - V_{12}^{n-1,2} \\ & & \dots - V_{22}^{n-1,j} - V_{22}^{n-1,2} \\ & & V_{11}^{n,j} V_{11}^{n,2} - (\delta_{12}^n - \alpha_{12}^n q_{n+1}) \\ & & V_{21}^{n,j} V_{21}^{n,2} - (\delta_{22}^n - \alpha_{22}^n q_{n+1}) \end{pmatrix}$$

Припускається, що виконана умова однозначної розв'язності крайової задачі (3.37)–(3.41), тобто що визначник алгебраїчної системи (3.61) є відмінний від нуля

$$\Delta^*(p) \equiv \Delta_{12}(q_{n+1}l_n, q_{n+1}l_{n+1})\Delta'_{1,2n} - \Delta_{11}(q_{n+1}l_n, q_{n+1}l_{n+1})\Delta_{1,2n} \neq 0. \quad (3.62)$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (3.61), підстановки одержаних значень підстановки одержаних значень  $A_k, B_k, D_{1_k}, D_{2_k}, E_{1_k}, E_{2_k}; k = \overline{1, n+1}$  в (3.46), (3.47) після низки перетворень шляхом розкриття визначників  $\Delta_{A_k}^* chq_k z + \Delta_{B_k}^* shq_k z, k = \overline{1, n+1}$  отримуємо аналітичні вирази для обчислення компонентів  $c_k^*(p, z)$  вектор-функції – розв'язку крайової задачі (3.37)–(3.41) [21, 28]:

$$C_1^*(p, z) = \frac{1}{\Delta^*(p)} \left( \Delta_{A_1}^* chq_1 z + \Delta_{B_1}^* shq_1 z \right) + \int_{l_0}^{l_1} E_1^*(p, z, \xi) \cdot F_1^*(p, \xi) d\xi =$$

$$= \frac{1}{\Delta^*(p)} \begin{vmatrix} \omega_1^* & \Phi_{12}^0(q_1 z, q_1 l_0) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \Phi_{11}^1(q_1 z, q_1 l_1) & -V_{12}^{11} & -V_{12}^{12} & \dots \\ G_1^* & \Phi_{21}^1(q_1 z, g_1 l_1) & -V_{22}^{11} & -V_{22}^{12} & \dots \\ 0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{12}^{21} & \dots \\ G_2^* & 0 & V_{21}^{21} & V_{21}^{22} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ G_n^* & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} + \int_{l_0}^{l_1} E_1^*(p, z, \xi) F_1^*(p, \xi) d\xi;$$

$$c_k^*(p, z) = \frac{1}{\Delta^*(p)} \left( \Delta_{A_k}^* chq_k z + \Delta_{B_k}^* shq_k z \right) + \int_{l_{k-1}}^{l_k} E_k^*(p, z, \xi) \cdot F_k^*(p, \xi) d\xi = \frac{1}{\Delta^*(p)}.$$

$$\begin{vmatrix}
V_{12}^{01} & V_{12}^{02} & 0 & \dots & 0 & \omega_1^* & 0 & \dots & 0 \\
V_{11}^{11} & V_{11}^{12} & -V_{12}^{11} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
V_{21}^{11} & V_{21}^{12} & -V_{22}^{11} & \dots & 0 & G_1^* & 0 & \dots & 0 \\
0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{11}^{22} & \dots & & & \dots & 0 \\
\dots & & \dots & \dots & \dots & & \dots & \dots & \\
0 & & & \dots & V_{11}^{k-1,1} & -V_{11}^{k-1,2} & 0 & -\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) & 0 & \dots \\
\dots & & & \dots & V_{21}^{k-1,1} & V_{21}^{k-1,2} & G_{k-1}^* & -\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) & 0 & \dots \\
0 & & & \dots & 0 & 0 & 0 & \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) & -V_{12}^{k1} & \dots \\
0 & & & \dots & 0 & 0 & G_k^* & \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) & -V_{22}^{k1} & \dots \\
\dots & & & & & & & & & \\
0 & & & & & & 0 & & & \dots \\
0 & & & & & & G_n^* & 0 & & \dots
\end{vmatrix} +$$

$$+ \int_{l_{k-1}}^{l_k} E_k^*(p, z, \xi) \cdot F_k^*(p, \xi) d\xi; \quad k = \overline{2, n};$$

$$c_{n+1}^*(p, z) = \frac{1}{\Delta^*(p)} \begin{vmatrix}
V_{12}^{01} & V_{12}^{02} & 0 & 0 & 0 & \dots & \omega_1^* \\
V_{11}^{11} & V_{11}^{12} & -V_{12}^{11} & -V_{12}^{12} & 0 & \dots & 0 \\
V_{21}^{11} & V_{21}^{12} & -V_{22}^{11} & -V_{22}^{12} & 0 & \dots & G_1^* \\
0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{11}^{22} & -V_{12}^{21} & \dots & 0 \\
0 & 0 & V_{21}^{21} & V_{21}^{22} & -V_{22}^{21} & \dots & G_2^* \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & & & & & -V_{12}^{n-1,1} & -V_{12}^{n-1,2} & 0 \\
0 & & & & & -V_{22}^{n-1,1} & -V_{22}^{n-1,2} & G_{n-1}^* \\
0 & & & & & V_{11}^{n1} & V_{11}^{n2} & 0 \\
0 & & & & & V_{21}^{n2} & V_{21}^{n2} & G_n^*
\end{vmatrix}.$$

$$\cdot e^{q_{n+1}(z-l_n)} + \int_{l_n}^{\infty} E_{n+1}^*(p, z, \xi) F_{n+1}^*(p, \xi) d\xi.$$

Розкриваючи визначники  $\Delta_{A_k}^* chq_k z + \Delta_{B_k}^* shq_k z, k = \overline{1, n+1}$ , після перетворень отримуємо загальні вирази для знаходження компонентів  $c_k^*(p, z)$  вектор – функції – розв’язку неоднорідної крайової задачі (3.42)–(3.44) у вигляді:



$$c_k^*(p, z) = W_{l_k}^*(p, z) \cdot \omega_1^*(p) + \sum_{j=1}^{n+1} \int_{l_{j-1}}^{l_j} H_{k,j}^*(p, z, \xi) \cdot F_j^*(p, \xi) d\xi; \quad k = \overline{1, n+1}; l_{n+1} = \infty. \quad (3.63)$$

Тут головні розв'язки неоднорідної крайової задачі (3.42)–(3.44) подані нижче.

Вектор функцій впливу крайової умови  $\omega_1^*(p)$  на  $k$  – тий сегмент неоднорідного нанопористого середовища:

$$W_{l_k}^*(p, z) = \begin{cases} \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 z) \cdot A_{1,2} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 z) \cdot A'_{1,2} & ; k = 1 \\ \frac{1}{\Delta^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} q_s h_{l_s} \left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} \right] & ; k = \overline{1, n} \\ \frac{1}{\Delta^*(p)} \prod_{s=1}^n q_s h_{l_s} \cdot e^{-q_{n+1}(z-l_n)} & k = n+1 \end{cases} \quad (3.64)$$

Компоненти матриці впливу  $j$  – ї неоднорідності  $F_j^*(p, \xi)$  (спричиненою  $j$  – ми складовими початкових концентрацій адсорбтиву у газовій фазі  $C_{o_j}(z)$  та нанопорах  $a_{o_j}(z)$ ) на  $k$ -й сегмент нанопористого середовища  $H_{k,j}^*(p, z, \xi)$ :

- на перший сегмент  $H_{1,j}^*(p, z, \xi)$ :

$$H_{1,j}^*(p, z, \xi) = \begin{cases} \frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z)}{q_1 \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A'_{1,2} - \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A_{1,2} \right] & ; j = 1 \\ \frac{\prod_{s=1}^{j-1} q_s h_{l_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right] & ; j = \overline{2, n} \\ - \frac{\prod_{s=1}^n q_s h_{l_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} & ; j = n+1 \end{cases} \quad (3.65)$$

- на  $k$ -ий сегмент  $H_{k,j}^*(p, z, \xi)$ ,  $k = \overline{2, n}$ :

$$\begin{aligned}
H_{kj}^*(p, z, \xi) = & \begin{cases} \frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi)}{q_1 \Delta^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} h_{1_s} q_s \cdot \left[ \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} - \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) \cdot A_{1,2k} \right] & ; j = 1 \\ \\ \frac{\prod_{s=j}^{k-1} q_s h_{1_s}}{q_j \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} \right] \cdot \\ \cdot \left[ \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{1,2j-2} \right] & ; j = \overline{2, k-1} \\ \\ \frac{1}{q_k \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} \right] \cdot \\ \cdot \left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) A'_{1,2k} \right] & ; j = k \\ \\ \frac{\prod_{s=k}^{j-1} q_s h_{2_s}}{q_k \cdot \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} \right] \\ \cdot \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right] & ; j = \overline{k+1, n} \\ \\ - \frac{\prod_{s=k}^n q_s h_{2_s}}{q_k \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} \right] e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)} & ; j = n+1 \end{cases} \quad (3.66)
\end{aligned}$$

- впливу на  $n+1$ -й сегмент середовища  $H_{n+1,j}^*(p, z, \xi)$ :

$$\begin{aligned}
H_{n+1,j}^*(p, z, \xi) = & \frac{1}{\Delta^*(p)} \begin{cases} - \frac{\prod_{s=1}^n h_{1_s} q_s}{q_1} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi) e^{-q_{n+1}(z - l_n)} & ; j = 1 \\ \\ \frac{\prod_{s=j}^n h_{1_s} q_s}{q_j} \left[ \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{1,2j-2} \right] e^{-q_{n+1}(z - l_n)} & ; j = \overline{2, n} \\ \\ - \frac{e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}}{q_{n+1}} \left[ \Phi_{22}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta_{1,2n} - \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta'_{1,2n} \right] & ; j = n+1 \end{cases} \quad (3.67)
\end{aligned}$$

**Перехід до оригіналів.** Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (3.37)–(3.41)  $W_{1_k}^*(p, z), R_{1_{kj}}^*(p, z), R_{2_{kj}}^*(p, z), H_{k,k_1}^*(p, z, \xi)$  є точки галуження  $p = \infty$  та

$$p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[ S_1 \pm \sqrt{S_2} \right] < 0; \quad S_1 = \beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k; \quad S_2 = (\eta_k - \beta_k \gamma_k)^2 = \beta_k \left[ \beta_k(1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k \right] > 0.$$

Отже, при переході до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [60, 69]:

$$\begin{aligned}
 W_{l_k}(t, z) &= L^{-1} \left[ W_{l_k}^*(p, z) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} W_{l_k}^*(p, z) \cdot e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} W_{l_k}^*(p, z) e^{pt} dp = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{l_k}^*(i\nu, z) e^{i\nu t} d\nu = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[ W_{l_k}^*(i\nu, z) e^{i\nu t} \right] d\nu; \\
 H_{k, k_1}^*(t, z, \xi) &= L^{-1} \left[ H_{k, k_1}^*(p, z, \xi) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[ H_{k, k_1}^*(i\nu, z, \xi) e^{i\nu t} \right] d\nu.
 \end{aligned} \tag{3.68}$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (3.61), з врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (3.64)–(3.67) та формул (3.68), отримуємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (3.37)–(3.41):

$$\begin{aligned}
 c_k(t, z) &= \int_0^t W_{l_k}(t - \tau, z) \cdot \omega_1(\tau) d\tau + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{k, k_1}(t - \tau; z, \xi) C_{0_{k_1}}(\xi) d\xi + \\
 &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{inter_{k_1}}} H_{k, k_1}(t - \tau; z, \xi) e^{-\beta_{k_1} \gamma_{k_1} \tau} \cdot a_{0_{k_1}}(\xi) d\xi d\tau
 \end{aligned} \tag{3.69}$$

$$a_k(t, z) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} \cdot c_k(\tau, z) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} \cdot a_{0_k}(z). \tag{3.70}$$

**Теорема (про розв'язність)** Якщо виконується умова однозначної розв'язності крайової задачі та шукані і задані функції є оригіналами за Лапласом то розв'язок крайової задачі (3.37)–(3.40), існує і єдиний і визначається формулами (3.69), (3.70) [70].

**Алгоритми обчислення визначника системи та головних розв'язків задачі (3.37)–(3.41)**

**Схема алгоритму обчислення визначника системи  $\Delta^*(p)$**

Розклавши визначник системи по останньому  $(2n+1)$ -му стовпчику, одержуємо:

$$\Delta^*(p) = (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n) \Delta_{\overline{1,2n}} - (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n) \Delta'_{\overline{1,2n}}, \quad (3.71)$$

$$\Delta(iv) = \bar{\Delta}(v) + i\tilde{\Delta}(v),$$

$$\bar{\Delta}(v) = ((\alpha_{22}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{22}^n) \bar{\Delta}_{\overline{1,2n}} - \varphi_{2_{n+1}} \tilde{\Delta}_{\overline{1,2n}}) - (\alpha_{12}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{12}^n) \bar{\Delta}'_{\overline{1,2n}} - \varphi_{2_{n+1}} \tilde{\Delta}'_{\overline{1,2n}}),$$

$$\tilde{\Delta}(v) = \left( (\varphi_{2_{n+1}} \bar{\Delta}_{\overline{1,2n}} + (\alpha_{22}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{22}^n) \tilde{\Delta}_{\overline{1,2n}}) - (\varphi_{2_{n+1}} \bar{\Delta}'_{\overline{1,2n}} + (\alpha_{12}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{12}^n) \tilde{\Delta}'_{\overline{1,2n}}) \right).$$

**Рекурсивна процедура обчислення визначників  $\Delta_{\overline{1,2k}}, \Delta'_{\overline{1,2k}}$ :**

$$\Delta'_{\overline{1,2k}} = \begin{vmatrix} -V_{22}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & -V_{22}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) & V_{21}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix} \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \begin{vmatrix} -V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & -V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) & -V_{21}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix} \Delta'_{\overline{1,2k-2}},$$

$$\Delta_{\overline{1,2k}} = \begin{vmatrix} -V_{22}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & -V_{22}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k) & -V_{11}^{k2}(q_k l_{k-1}) \end{vmatrix} \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \begin{vmatrix} -V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & -V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k) & V_{11}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix} \Delta'_{\overline{1,2k-2}},$$

або

$$\begin{aligned} \Delta_{\overline{1,2k}} &= \Delta_{11}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta'_{\overline{1,2k-2}} - \Delta_{21}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta_{\overline{1,2k-2}}, \\ \Delta'_{\overline{1,2k}} &= \Delta_{12}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta'_{\overline{1,2k-2}} - \Delta_{22}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta_{\overline{1,2k-2}}; k = \overline{2, n}. \end{aligned}$$

Тут

$$\Delta_{\overline{1,2}} = \begin{vmatrix} V_{12}^{01} & V_{11}^{11} \\ V_{12}^{02} & V_{11}^{12} \end{vmatrix} \equiv \Delta_{11}^1(q_1 l_0, q_1 l_1), \quad \Delta'_{\overline{1,2}} = \begin{vmatrix} V_{12}^{01} & V_{21}^{11} \\ V_{12}^{02} & V_{21}^{12} \end{vmatrix} \equiv \Delta_{21}^1(q_1 l_0, q_1 l_1),$$

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{12}^{k-1,1} \cdot V_{11}^{k2} - V_{12}^{k-1,2} \cdot V_{11}^{k1}, \quad \Delta_{22}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{22}^{k-1,1} \cdot V_{21}^{k2} - V_{22}^{k-1,2} \cdot V_{21}^{k1},$$

$$\Delta_{12}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{12}^{k-1,1} \cdot V_{21}^{k2} - V_{12}^{k-1,2} \cdot V_{21}^{k1}, \quad \Delta_{21}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{22}^{k-1,1} \cdot V_{11}^{k2} - V_{22}^{k-1,2} \cdot V_{11}^{k1},$$

$$\Delta_{1,2}(i\nu) = \Delta_{11}(i\nu), \quad \Delta'_{1,2}(i\nu) = \Delta_{21}(i\nu),$$

$$\Delta_{1,2}(i\nu) = \bar{\Delta}_{11}^1(\nu, l_0, l_1) - i\tilde{\Delta}_{11}^1(\nu, l_0, l_1), \quad \Delta'_{1,2}(i\nu) = \bar{\Delta}_{21}^1(\nu, l_0, l_1) - i\tilde{\Delta}_{21}^1(\nu, l_0, l_1) !$$

Відповідно обчислюються визначники:

$$\Delta_{11}(\nu, l_{k-1}, l_k) = \bar{\Delta}_{11} + i\tilde{\Delta}_{11},$$

де

$$\bar{\Delta}_{11} = (\bar{V}_{12}^{k-1,1} \bar{V}_{11}^{k2} - \tilde{V}_{12}^{k-1,1} \tilde{V}_{11}^{k2} - (\bar{V}_{12}^{k-1,2} \bar{V}_{11}^{k1} - \tilde{V}_{12}^{k-1,2} \tilde{V}_{11}^{k1})),$$

$$\tilde{\Delta}_{11} = (\bar{V}_{12}^{k-1,1} \tilde{V}_{11}^{k2} + \tilde{V}_{12}^{k-1,1} \bar{V}_{11}^{k2}) - (\bar{V}_{12}^{k-1,2} \tilde{V}_{11}^{k1} + \tilde{V}_{12}^{k-1,2} \bar{V}_{11}^{k1});$$

$$\Delta_{22}(\nu, l_{k-1}, l_k) = \bar{\Delta}_{22} + i\tilde{\Delta}_{22},$$

де

$$\bar{\Delta}_{22} = (\bar{V}_{22}^{k-1,1} \bar{V}_{21}^{k2} - \tilde{V}_{22}^{k-1,1} \tilde{V}_{21}^{k2} - (\bar{V}_{22}^{k-1,2} \bar{V}_{21}^{k1} - \tilde{V}_{22}^{k-1,2} \tilde{V}_{21}^{k1}))$$

$$\tilde{\Delta}_{22} = (\bar{V}_{22}^{k-1,1} \tilde{V}_{21}^{k2} + \tilde{V}_{22}^{k-1,1} \bar{V}_{21}^{k2}) - (\bar{V}_{22}^{k-1,2} \tilde{V}_{21}^{k1} + \tilde{V}_{22}^{k-1,2} \bar{V}_{21}^{k1});$$

$$\Delta_{12}(\nu, l_{k-1}, l_k) = \bar{\Delta}_{12} + i\tilde{\Delta}_{12},$$

де

$$\bar{\Delta}_{12} = (\bar{V}_{12}^{k-1,1} \bar{V}_{21}^{k2} - \tilde{V}_{12}^{k-1,1} \tilde{V}_{21}^{k2} - (\bar{V}_{12}^{k-1,2} \bar{V}_{21}^{k1} - \tilde{V}_{12}^{k-1,2} \tilde{V}_{21}^{k1})),$$

$$\tilde{\Delta}_{12} = (\bar{V}_{12}^{k-1,1} \tilde{V}_{21}^{k2} + \tilde{V}_{12}^{k-1,1} \bar{V}_{21}^{k2}) - (\bar{V}_{12}^{k-1,2} \tilde{V}_{21}^{k1} + \tilde{V}_{12}^{k-1,2} \bar{V}_{21}^{k1});$$

$$\Delta_{21}(\nu, l_{k-1}, l_k) = \bar{\Delta}_{21} + i\tilde{\Delta}_{21},$$

де

$$\bar{\Delta}_{21} = (\bar{V}_{22}^{k-1,1} \bar{V}_{11}^{k2} - \tilde{V}_{22}^{k-1,1} \tilde{V}_{11}^{k2} - (\bar{V}_{22}^{k-1,2} \bar{V}_{11}^{k1} - \tilde{V}_{22}^{k-1,2} \tilde{V}_{11}^{k1})),$$

$$\tilde{\Delta}_{21} = (\bar{V}_{22}^{k-1,1} \tilde{V}_{11}^{k2} + \tilde{V}_{22}^{k-1,1} \bar{V}_{11}^{k2}) - (\bar{V}_{22}^{k-1,2} \tilde{V}_{11}^{k1} + \tilde{V}_{22}^{k-1,2} \bar{V}_{11}^{k1}),$$

$$V_{ij}^{k1}(q_s(i\nu)l_k) = \bar{V}_{ij}^{k1}(\nu) + i\tilde{V}_{ij}^{k1}(\nu), \quad V_{ij}^{k2}(q_s(i\nu)l_k) = \bar{V}_{ij}^{k2}(\nu) + i\tilde{V}_{ij}^{k2}(\nu).$$

Відповідно обчислюються компоненти дійсних і уявних частин визначників:

$$\Delta_{\overline{1,2k}}(i\nu) = \bar{\Delta}_{\overline{1,2k}}(\nu) + i\tilde{\Delta}_{\overline{1,2k}}(\nu),$$

де

$$\bar{\Delta}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{11}^k \bar{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} - \tilde{\Delta}_{11}^k \tilde{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} - (\bar{\Delta}_{21}^k \bar{\Delta}_{\overline{1,2k-2}} - \tilde{\Delta}_{21}^k \tilde{\Delta}_{\overline{1,2k-2}}),$$

$$\tilde{\Delta}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{11}^k \tilde{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} + \tilde{\Delta}_{11}^k \bar{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} - (\bar{\Delta}_{21}^k \tilde{\Delta}_{\overline{1,2k-2}} + \tilde{\Delta}_{21}^k \bar{\Delta}_{\overline{1,2k-2}});$$

$$\Delta'_{\overline{1,2k}}(i\nu) = \bar{\Delta}'_{\overline{1,2k}}(\nu) + i\tilde{\Delta}'_{\overline{1,2k}}(\nu),$$

де

$$\bar{\Delta}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{12}^k \bar{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} - \tilde{\Delta}_{12}^k \tilde{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} - (\bar{\Delta}_{22}^k \bar{\Delta}_{\overline{1,2k-2}} - \tilde{\Delta}_{22}^k \tilde{\Delta}_{\overline{1,2k-2}}),$$

$$\tilde{\Delta}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{12}^k \tilde{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} + \tilde{\Delta}_{12}^k \bar{\Delta}'_{\overline{1,2k-2}} - (\bar{\Delta}_{22}^k \tilde{\Delta}_{\overline{1,2k-2}} + \tilde{\Delta}_{22}^k \bar{\Delta}_{\overline{1,2k-2}})$$

**Рекурсивна процедура обчислення визначників**  $A_{\overline{1,2j}}, A'_{\overline{1,2j}}$  (за аналогією процедури обчислення визначників  $\Delta_{\overline{1,2k}}, \Delta'_{\overline{1,2k}}$ )

$$A_{\overline{1,2n}} = \alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n, \quad A'_{\overline{1,2n}} = \alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n,$$

де

$$\begin{aligned} A_{\overline{1,2n}} &= \alpha_{22}^n (\varphi_{l_{n+1}} + i\varphi_{2_{n+1}}) - \delta_{22}^n = \alpha_{22}^n \varphi_{l_{n+1}} - \delta_{22}^n + i\varphi_{2_{n+1}} \equiv \bar{A}_{\overline{1,2n}} + i\tilde{A}_{\overline{1,2n}} \\ A'_{\overline{1,2n}} &= \alpha_{12}^n (\varphi_{l_{n+1}} + i\varphi_{2_{n+1}}) - \delta_{12}^n = \alpha_{12}^n \varphi_{l_{n+1}} - \delta_{12}^n + i\varphi_{2_{n+1}} \equiv \bar{A}'_{\overline{1,2n}} + i\tilde{A}'_{\overline{1,2n}}. \end{aligned}$$

Відповідно визначники  $A_{\overline{1,2n-2}}, A'_{\overline{1,2n-2}}$  матимуть вигляд:

$$A_{\overline{1,2n-2}} = \begin{vmatrix} -V_{22}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{22}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n) & V_{11}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n) - \begin{vmatrix} -V_{22}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{22}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) & V_{21}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n),$$

$$A'_{\overline{1,2n-2}} = \begin{vmatrix} -V_{12}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{12}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n) & V_{11}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \beta_{22}^n) - \begin{vmatrix} -V_{12}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{12}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) & V_{21}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n).$$

Визначники  $A_{\overline{1,2k}}, A'_{\overline{1,2k}}$  відповідно визначаються:

$$A_{\overline{1,2k}} = \begin{vmatrix} -V_{22}^{k+1,1}(q_{k+2} l_{k+1}) & -V_{22}^{k+1,2}(q_{k+2} l_{k+1}) \\ V_{11}^{k+2,1}(q_{k+2} l_{k+2}) & V_{11}^{k+2,2}(q_{k+2} l_{k+2}) \end{vmatrix} A_{\overline{1,2k+2}} - \begin{vmatrix} -V_{22}^{k+1,1}(q_{k+2} l_{k+1}) & -V_{22}^{k+1,2}(q_{k+2} l_{k+1}) \\ V_{21}^{k+2,1}(q_{k+2} l_{k+2}) & -V_{21}^{k+2,2}(q_{k+2} l_{k+2}) \end{vmatrix} \cdot A'_{\overline{1,2k+2}};$$

$$A'_{\overline{1,2k}} = \begin{vmatrix} -V_{12}^{k+1,1}(q_{k+2} l_{k+1}) & -V_{12}^{k+1,2}(q_{k+2} l_{k+1}) \\ V_{11}^{k+2,1}(q_{k+2} l_{k+2}) & V_{11}^{k+2,2}(q_{k+2} l_{k+2}) \end{vmatrix} A_{\overline{1,2k+2}} - \begin{vmatrix} -V_{12}^{k+1,1}(q_{k+2} l_{k+1}) & -V_{12}^{k+1,2}(q_{k+2} l_{k+1}) \\ V_{21}^{k+2,1}(q_{k+2} l_{k+2}) & -V_{21}^{k+2,2}(q_{k+2} l_{k+2}) \end{vmatrix} \cdot A'_{\overline{1,2k+2}};$$

або

$$A_{\overline{1,2k}} = \Delta_{22}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A'_{\overline{1,2k+2}} - \Delta_{21}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A_{\overline{1,2k+2}};$$

$$A'_{\overline{1,2k}} = \Delta_{12}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A'_{\overline{1,2k+2}} - \Delta_{11}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A_{\overline{1,2k+2}}; k = \overline{2, n-2}.$$

Відповідно обчислюються компоненти дійсних і уявних частин визначників:

$$A_{\overline{1,2k}}(i\nu) = \bar{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) + i\tilde{A}_{\overline{1,2k}}(\nu),$$

де

$$\bar{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{22}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{22}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{21}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{21}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$\tilde{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{22}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{22}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{21}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{21}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}});$$

$$A'_{\overline{1,2k}}(i\nu) = \bar{A}'_{\overline{1,2k}}(\nu) + i\tilde{A}'_{\overline{1,2k}}(\nu),$$

де

$$\bar{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{12}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{12}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{11}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{11}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$\tilde{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{12}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{12}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{11}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{11}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}}).$$

Тут

$$V_{ij}^{k1}(q_s(i\nu)l_k) = \bar{V}_{ij}^{k1}(\nu) + i\tilde{V}_{ij}^{k1}(\nu), \quad V_{ij}^{k2}(q_s(i\nu)l_k) = \bar{V}_{ij}^{k2}(\nu) + i\tilde{V}_{ij}^{k2}(\nu),$$

$$\bar{V}_{ij}^{k1}(\nu) = \alpha_{ij}^k \left( \varphi_{1_s} \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \cos(\Gamma_{2_s} l_k) - \varphi_{2_s} \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k) \right) + \delta_{ij}^k \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k),$$

$$\tilde{V}_{ij}^{k1}(\nu) = \alpha_{ij}^k \varphi_{1_s} \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \cos(\Gamma_{2_s} l_k) + \delta_{ij}^k \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k),$$

$$\bar{V}_{ij}^{k2}(\nu) = \alpha_{ij}^k \left( \varphi_{1_s} \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \cos(\Gamma_{2_s} l_k) - \varphi_{2_s} \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k) \right) + \delta_{ij}^k \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k),$$

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_{ij}^k(\nu, l_k, z) = & A_{ij}^{k2}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - B_{ij}^{k2}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - \\ & - A_{ij}^{k1}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - B_{ij}^{k1}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) \end{aligned},$$



$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_{ij}^k(\nu, l_k, z) = & B_{ij}^{k2}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - A_{ij}^{k2}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - \\ & - B_{ij}^{k1}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) + A_{ij}^{k1}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) \quad ,\end{aligned}$$

$$ch(q_k(iv)z) \equiv ch(\Gamma_{1_k}(\nu)z + i\Gamma_{2_k}(\nu)z) = \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) + i \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) ,$$

$$sh(q_k(iv)z) = \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) + i \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) ,$$

$$q_k(iv) = \varphi_{1_k}(\nu) + i\varphi_{2_k}(\nu) ,$$

$$\varphi_{1_k}(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_{1_k}^2(\nu) + \Gamma_{2_k}^2(\nu)) + \Gamma_{1_k}(\nu)}{2} \right]^{1/2} ,$$

$$\varphi_{2_k}(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_{1_k}^2(\nu) + \Gamma_{2_k}^2(\nu))^{1/2} - \Gamma_{1_k}(\nu)}{2} \right]^{1/2} ,$$

$$q_k^2(iv) = \Gamma_{1_k}(\nu) + i\Gamma_{2_k}(\nu) ,$$

$$\Gamma_{1_k}(\nu) = \frac{\nu^2 \beta_k^2 (\gamma_k \eta_k + 1)}{D_{inter_k}(\beta_k^2 \gamma_k^2 + \nu^2)} , \quad \Gamma_{2_k}(\nu) = \frac{\nu(\nu^2 + \beta_k^2 \gamma_k + \beta_k^2 \gamma_k^2 (\eta_k + 1))}{D_{inter_k}(\beta_k^2 \gamma_k^2 + \nu^2)} ,$$

$$q_k^m(iv) = (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} (\cos n\psi_k + i \sin n\psi_k) = \Upsilon_{1_k}(\nu) + i\Upsilon_{2_k}(\nu) ,$$

$$\Upsilon_{1_k}(\nu) = (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} \cos n\psi_k , \quad \Upsilon_{2_k}(\nu) = (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} \sin n\psi_k ,$$

$$\psi_k = \arg(q_k(iv)) = \arctg\left(\frac{\varphi_{2_k}}{\varphi_{1_k}}\right) , \quad \varphi_{1_k} > 0, \varphi_{2_k} > 0 ,$$

$$q_k^m(iv) = (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} (\cos n\psi_k + i \sin n\psi_k) .$$

### 3.5. Алгоритми обчислення компонентів матриці впливу.

Обчислення компоненти  $H_{11}^*(p, z, \xi)$

$$H_{11}^*(p, z, \xi) = -\frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z)}{q_1 \Delta^*(p) \Delta_{11}(q_1 l_0, q_1 l_1)} \left[ h_{11} q_1 \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi) A'_{1,2} - \Delta^*(p) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \right].$$

Розкривши визначник  $\Delta^*(p)$  за першими двома стовпчиками та врахувавши співвідношення  $h_{11} q_1 = \begin{vmatrix} V_{11}^{11}(q_1 l_1) & V_{11}^{12}(q_1 l_1) \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1) & V_{21}^{12}(q_1 l_1) \end{vmatrix}$ , отримаємо:

$$\begin{aligned} & \left[ h_{11} q_1 \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi) A'_{1,2} - \Delta^*(p) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \right] = \\ & = \begin{vmatrix} ch q_1 \xi & sh q_1 \xi \\ V_{12}^{01}(q_1 l_0) & V_{12}^{02}(q_1 l_0) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} V_{11}^{11}(q_1 l_1) & V_{11}^{12}(q_1 l_1) \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1) & V_{21}^{12}(q_1 l_1) \end{vmatrix} A'_{1,2} + \Delta_{11}(q_1 l_0, q_1 l_1) \cdot A'_{1,2} \cdot \Phi_{11}^1(q_1 \xi, q_1 l_1) - \\ & - \begin{vmatrix} V_{12}^{01} & V_{12}^{02} \\ V_{21}^{11} & V_{21}^{12} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} ch q_1 \xi & sh q_1 \xi \\ V_{11}^{11}(q_1 l_1) & V_{11}^{12}(q_1 l_1) \end{vmatrix} \cdot A'_{1,2} = \Delta_{11}(q_1 l_0, q_1 l_1) \left[ \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) A'_{1,2} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A'_{1,2} \right]. \end{aligned}$$

Звідси

$$H_{11}^*(p, z, \xi) = -\frac{1}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \left[ \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A'_{1,2} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A'_{1,2} \right].$$

$$H_{11}(iv, z, \xi) = -\frac{1}{(\varphi_{1_k} + i\varphi_{2_k})(\bar{\Delta}(v) - i\tilde{\Delta}(v))} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \left[ \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) A'_{1,2} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) A'_{1,2} \right]$$

Після перетворення отримуємо оригінал:

$$\begin{aligned} H_{11}(v, z, \xi) & \equiv \text{Re} \left( H_{11}^*(iv, z, \xi) \right) = \\ & = - \frac{\left( \begin{aligned} & \left( ((\varphi_{1_k}(v) \bar{\Delta}(v) - \varphi_{2_k}(v) \tilde{\Delta}(v)) \bar{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z) - (\varphi_{1_k}(v) \tilde{\Delta}(v) + \varphi_{2_k}(v) \bar{\Delta}(v)) \tilde{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z)) \cdot \right. \\ & \cdot (\bar{\Phi}_{11}^1(v, l_k, \xi) \bar{A}_{1,2} - \tilde{\Phi}_{11}^1(v, l_k, \xi) \tilde{A}_{1,2} + \bar{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi) \bar{A}'_{1,2} - \tilde{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi) \tilde{A}'_{1,2}) \end{aligned} \right) - \right. \\ & \left. - \left( ((\varphi_{1_k}(v) \bar{\Delta}(v) - \varphi_{2_k}(v) \tilde{\Delta}(v)) \tilde{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z) + (\varphi_{1_k}(v) \tilde{\Delta}(v) + \varphi_{2_k}(v) \bar{\Delta}(v)) \bar{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z)) \cdot \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot (\bar{\Phi}_{11}^1(v, l_k, \xi) \tilde{A}_{1,2} + \tilde{\Phi}_{11}^1(v, l_k, \xi) \bar{A}_{1,2} + \bar{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi) \tilde{A}'_{1,2} + \tilde{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi) \bar{A}'_{1,2}) \right) \right) \\ & \quad \left( \varphi_{1_k}^2(v) - \varphi_{2_k}^2(v) \right) (\bar{\Delta}^2(v) - \tilde{\Delta}^2(v)) \end{aligned}$$

Обчислення компонентів  $H_{1j}^*(p, z, \xi)$ ,  $j = \overline{2, n}$

$$H_{1j}^*(p, z, \xi) = \frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \prod_{s=1}^{j-2} q_{s+1} h_{2_s}}{\Delta^*(p) \cdot \Delta_{11}(q_j l_j, q_j l_{j-1})} \left[ \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) h_{2_j} A'_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) q_j h_{2_{j-1}} A'_{1,2j} h_{1_j} \right].$$

$$\begin{aligned} & \left[ \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) h_{2_j} A'_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) q_j h_{2_{j-1}} A'_{1,2j} h_{1_j} \right] = -\Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \cdot c_{2_j} \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} + c_{2_{j-1}} A'_{1,2j} \cdot \\ & \cdot \left[ \begin{vmatrix} chq_j \xi & shq_j \xi \\ V_{11}^{j1}(q_j l_j) & V_{11}^{j2}(q_j l_j) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} V_{12}^{j-1,1}(q_j l_{j-1}) & V_{12}^{j-1,2}(q_j l_{j-1}) \\ V_{21}^{j1}(q_j l_j) & V_{21}^{j2}(q_j l_j) \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} chq_j \xi & shq_j \xi \\ V_{12}^{j-1,1}(q_j l_j) & V_{12}^{j-1,2}(q_j l_j) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} V_{12}^{j-1,1}(q_j l_{j-1}) & V_{12}^{j-1,2}(q_j l_{j-1}) \\ V_{11}^{j1}(q_j l_j) & V_{11}^{j2}(q_j l_j) \end{vmatrix} \right] = \\ & = h_{2_{j-1}} \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right], \end{aligned}$$

$$\text{Отже, } H_{1j}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=1}^{j-1} q_s h_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right].$$

**Обчислення компонент**  $H_{kj}^*(p, z, \xi), k = \overline{2, n}; j = \overline{2, k-1}$

$$H_{kj}^*(p, z, \xi) = \frac{\left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} \right]}{\Delta^*(p) \cdot \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j)} \left[ \begin{aligned} & -h_{1_j} \Delta_{1,2j-2} \prod_{s=j}^{k-1} h_{1_s} q_s \cdot \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) + \\ & + h_{2_{j-1}} \Delta_{1,2j} \prod_{s=j+1}^{k-1} h_{1_s} q_s \cdot \Phi_{11}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) \end{aligned} \right].$$

Розклавши  $\Delta_{1,2j}$  за двома останніми стовпчиками, маємо:

$$\begin{aligned} & \left[ -c_{1_j} \cdot \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \left[ \Delta_{11} \cdot \Delta'_{1,2j-2} - \begin{vmatrix} V_{22}^{j-1,1} & V_{22}^{j-1,2} \\ V_{11}^{j1} & V_{11}^{j2} \end{vmatrix} \Delta_{1,2j-2} \right] + \Phi_{11}^j(q_j l_{j-1}, q_j \xi) c_{2_{j-1}} q_j c_{1_j} \Delta_{1,2j-2} \right] = \\ & = \Delta_{11} \cdot \left[ \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta'_{1,2j-2} \right]. \end{aligned}$$

Отже,

$$\begin{aligned} H_{kj}^*(p, z, \xi) &= \frac{\prod_{s=j}^{k-1} q_s h_{1_s}}{q_j \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} \right] \cdot \\ & \cdot \left[ \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{1,2j-2} \right], \quad j = \overline{2, k-1}. \end{aligned}$$

**Обчислення компонентів**  $H_{kj}^*(p, z, \xi), k = \overline{2, n}; j = \overline{k+1, n}$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{kj}^* (p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=k}^{j-2} q_s h_{2_s}}{\Delta^*(p) \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j)} & \left[ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} \right] \cdot \\ & \cdot \left[ h_{2_{j-1}} \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j-2} - h_{1_{j-1}} h_{2_{j-1}} q_j \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} \right]. \end{aligned}$$

Розкривши визначник  $A_{1,2j-2}$  згідно (74) за першими двома стовпчиками, отримаємо:

$$A_{1,2j-2} = \begin{vmatrix} V_{12}^{j-1,1} & V_{12}^{j-1,2} \\ V_{21}^{j1} & V_{21}^{j2} \end{vmatrix} A'_{1,2j} - \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) A_{1,2j}, \text{ матимемо}$$

$$\left[ h_{2_{j-1}} \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j-2} - h_{1_j} h_{2_{j-1}} q_j \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} \right] = h_{2_{j-1}} \Delta_{11} \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right]$$

В результаті одержуємо:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{kj}^* (p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=k}^{j-1} q_s h_{2_s}}{q_k \Delta^*(p)} & \left[ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} \right] \cdot \\ & \cdot \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right]. \end{aligned}$$

**Обчислення компонента  $\mathbf{H}_{kk}^*(p, z, \xi), k = \overline{2, n}$**

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{kk}^* (p, z, \xi) = \frac{1}{\Delta^*(p) \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) q_k} \cdot \\ \cdot \left[ h_{2_{k-1}} q_k \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \Delta_{1,2k-2} \left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{1,2k} - \Phi_{22}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} \right] - \right. \\ \left. - h_{1_k} q_k \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) A'_{1,2k} \left[ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} \right] - \right. \\ \left. - \Delta^*(p) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \right]. \end{aligned}$$

Розкривши визначник  $\Delta^*(p)$  за  $2k-1$  – ім і  $2k$  – ім стовпцях, отримаємо:

$$H_{kk}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_k \Delta^*(p) \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \cdot \left[ \begin{aligned} & \left[ q_k h_{2_{k-1}} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) + \Delta_{21}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1} q_k z) \right] \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot \Delta_{1,2k-2} \overline{A_{1,2k}} - \\ & - \left[ q_k h_{2_{k-1}} \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) + \Delta_{22}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \right] \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot \Delta_{1,2k-2} \overline{A_{1,2k}} + \\ & + \left[ \Delta_{12}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{11}^k(q_k l_{k-1} q_k \xi) - q_k h_{1_k} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \right] \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta_{1,2k-2}' \overline{A_{1,2k}}' + \\ & + q_k h_{1_k} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2}' \overline{A_{1,2k}}' - \\ & - \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2}' \overline{A_{1,2k}}' \end{aligned} \right].$$

Перетворивши вирази:

$$\begin{aligned} & \left[ q_k h_{2_{k-1}} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) + \Delta_{21}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1} q_k z) \right] = \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1} q_k z) \\ & \left[ q_k h_{2_{k-1}} \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) + \Delta_{22}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \right] = \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \begin{vmatrix} V_{12}^{k-1,1} & V_{12}^{k-1,2} \\ V_{21}^{k1} & V_{21}^{k2} \end{vmatrix} \\ & \left[ q_k h_{1_k} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) - \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \Phi_{12}^{k-1,1} \right] \begin{vmatrix} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) & V_{21}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix} \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2}' \overline{A_{1,2k}}' = \\ & = -\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2}' \overline{A_{1,2k}}'; \\ & \left[ \Delta_{12}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) - q_k h_{1_k} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \right] \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2}' \overline{A_{1,2k}}' = \\ & = \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2}' \overline{A_{1,2k}}'. \end{aligned}$$

Отримуємо:

$$\begin{aligned} H_{kk}^*(p, z, \xi) &= \frac{1}{q_k \Delta^*(p)} [\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2}'] \cdot \\ & \cdot [\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \overline{A_{1,2k}} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) \overline{A_{1,2k}}']. \end{aligned}$$

**Обчислення компонентів  $H_{n+1,j}^*(p, z, \xi)$ ,  $j = \overline{2, n}$**

$$\begin{aligned} H_{n+1,j}^*(p, z, \xi) &= \frac{1}{\Delta^*(p) \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j)} \prod_{s=j+1}^n h_{l_s} q_s \cdot \\ & \cdot \left[ h_{2_{j-1}} h_{l_j} q_j \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - h_{l_j} \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) \Delta_{1,2j} \right] e^{-q_{n+1}(z-l_n)}. \end{aligned}$$

Розклавши  $\Delta_{\overline{1,2j}}$  згідно з (70) за двома останніми стовпцями

$\Delta_{\overline{1,2j}} = \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \cdot \Delta'_{\overline{1,2j-2}} - \Delta_{21}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \cdot \Delta_{\overline{1,2j-2}}$ , отримуємо:

$$H_{n+1,j}^*(p, z, \xi) = \frac{e^{-q_{n+1}(z-l_n)}}{\Delta^*(p)\Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j)} \prod_{s=j}^n h_s q_s \cdot \left( \left[ h_{2_{j-1}} q_j \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) - \Delta_{21}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \right] \Delta_{\overline{1,2j-2}} - \left[ -\Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{\overline{1,2j-2}} \right] \right).$$

Обчисливши

$$\begin{aligned} & \left[ h_{2_{j-1}} q_j \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) - \Delta_{21}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \right] = \\ & = \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \begin{vmatrix} V_{12}^{j-1,1}(q_j l_{j-1}) & V_{12}^{j-1,2}(q_j l_{j-1}) \\ V_{11}^{j1}(q_j l_j) & V_{11}^{j2}(q_j l_j) \end{vmatrix} = \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j). \end{aligned}$$

отримуємо

$$H_{n+1,j}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=j}^n h_s q_s}{q_j \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} \left[ \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta_{\overline{1,2j-2}} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{\overline{1,2j-2}} \right], \quad j = \overline{2, n}$$

**Обчислення компонента матриці впливу  $H_{n+1,n+1}^*(p, z, \xi)$**

$$H_{n+1,n+1}^*(p, z, \xi) = \frac{e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}}{q_{n+1} \Delta^*(p) (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n)} \left[ q_{n+1} h_{2n} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} \Delta_{\overline{1,2n}} - \Delta^*(p) \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \right].$$

Розклавши  $\Delta^*(p)$  за останнім стовпцем  $\Delta^*(p) = (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n) \Delta_{\overline{1,2n}} - (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n) \Delta'_{\overline{1,2n}}$

та врахувавши співвідношення  $V_{22}^{n2}(q_{n+1} l_n) - V_{22}^{n1}(q_{n+1} l_n) = -\frac{e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}}{\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n}$ , отримаємо:

$$H_{n+1,n+1}^*(p, z, \xi) = -\frac{1}{q_{n+1} \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} \left[ \Phi_{22}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta_{\overline{1,2n}} - \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta'_{\overline{1,2n}} \right].$$

Перехід до оригіналу за Лапласом в обчислених нами компонентів матриці впливу здійснюється за схемою обчислення оригіналу компоненту  $H_{11}^*(p, z, \xi)$ .

### Позначення

$\Delta_{A_k}^* chq_k z + \Delta_{B_k}^* shq_k z, k = \overline{1, n}$  – визначники, утворені з головного визначника системи  $\Delta^*(p)$  заміною  $2k$  – го стовпчика стовпчиком правої частини системи та множенням  $2k + 1$  – го стовпчика на  $chq_k z, shq_k z, k = \overline{1, n}$ ;

$\Delta_{\overline{1, 2k}}$  – визначник, утворений з визначника системи  $\Delta^*(p)$  шляхом викреслювання перших  $2k$  рядків і стовпців (під номерами  $\overline{1, 2k}, k = \overline{1, n}$ );

$\Delta'_{\overline{1, 2k}}$  – визначник, утворений з визначника системи  $\Delta^*(p)$  шляхом викреслювання перших  $2k + 1$  рядків за виключенням  $2k$  – го (під номерами  $\overline{1, 2k - 1, 2k + 1}, k = \overline{1, n}$ ) і перших  $2k$  стовпців (під номерами  $\overline{1, 2k}, k = \overline{1, n}$ );

$+\Delta_{\overline{1, 2k}}$  – визначник, утворений з перших  $2k$  рядків і стовпців (під номерами  $\overline{1, 2k}, k = \overline{1, n}$ ) визначника системи  $\Delta^*(p)$ ;

$\Delta'_{\overline{1, 2k}}$  – визначник, утворений з перших  $2k + 1$  рядків за виключенням  $2k$  – го (під номерами  $\overline{1, 2k - 1, 2k + 1}, k = \overline{1, n}$ ) і перших  $2k$  стовпців (під номерами  $\overline{1, 2k}, k = \overline{1, n}$ ) визначника системи.

## Висновки

В монографії висвітлені нові теоретичні підходи та методи математичного моделювання процесів, асоційованих із застосуванням напівпровідникових наноструктур плоскої симетрії у приладах працюючих у терагерцовому і близькому інфрачервоному діапазонах електромагнітних хвиль та технології ідентифікації параметрів систем очиски відпрацьованих газів, технологічну базу яких становлять нанопористі середовища. В контексті цього, основні отримані результати полягають в наступному.

1. На основі запропонованого рекурсивного методу розв'язування стаціонарного нелінійного рівняння Шредінгера розвинута теорія коефіцієнта прозорості та спектральних параметрів (резонансних енергій та ширин) КСС в ДБРТС з урахуванням електрон-електронної взаємодії. Показано, що збільшення міжелектронної взаємодії деформує форму коефіцієнта прозорості  $D(E, \nu)$  від квазілоренцової до клиноподібної, зміщуючи його максимум в область більших електронних енергій. Для випадків нелоренцової форми залежності коефіцієнта прозорості від енергії електронів запропоновано поняття узагальнених резонансних енергій  $E_n(\nu)$  та ширин  $\Gamma_n(\nu)$ .

2. У малосигнальному наближенні на основі рекурсивного розв'язування повного нелінійного рівняння Шредінгера з урахуванням міжелектронної взаємодії розвинута теорію електронної провідності відкритої ДБРТС, як активного елемента квантового каскадного лазера чи квантового каскадного детектора.

3. Встановлено, що міжелектронна взаємодія слабо змінює величину динамічної провідності  $i$ , незалежно від її знака, зміщує положення максимуму в область більших енергій електромагнітного поля. При значній величині міжелектронної взаємодії, динамічна провідність  $\sigma$ , як функція електронної енергії, набуває клиноподібної форми, а як функція енергії електромагнітного поля – залишається квазілоренцовою. Показано, що наявність детальної інформації про залежність величини  $\sigma$  від  $E$  та  $\Omega$ , дає змогу оцінити важливі



спектральні параметри величин узагальнених резонансних енергій та ширин електронних КСС.

4. Розвинена квантова теорія електронного транспорту крізь відкриту багат шарову нано-РТС як у моделі активної зони, так і в моделі повного каскаду ККЛ в постійних поздовжньому електричному і поперечному магнітному полях з урахуванням взаємодії електронів з електромагнітним полем. Встановлено, що зі збільшенням напруженості магнітного поля  $\mathcal{H}$  РЕ перших трьох КСС електрона зростають: третього – рівномірно, а першого і другого – нерівномірно, з ознаками антикросінгу. Резонансна ширина третього КСС слабо залежить від напруженості магнітного поля, а ширин першого і другого КСС до напруженості  $\mathcal{H}=16\text{Тл}$  майже не змінюються, тоді як в інтервалі  $16\text{Тл} \leq \mathcal{H} \leq 22\text{Тл}$  відбувається взаємна зміна ширин цих станів. Причиною складної залежності спектральних параметрів КСС є зміщення максимумів функції розподілу ймовірності  $\rho_{n=1,2}(z)$  перебування електрона з другої у першу потенціальну яму зі збільшенням напруженості магнітного поля.

5. Вперше розрахована і проаналізована негативна активна динамічна провідність багат шарової РТС як у моделі активної зони, так і в моделі окремого каскаду ККЛ. Показано, що у процесах поглинання виникаюча динамічна провідність мала, а в процесах, що пов'язані з випромінюванням, зі збільшенням напруженості магнітного поля, величина динамічної провідності у прямому напрямку зменшується, а в оберненому – збільшується..

6. Розроблені високопродуктивні методи і обчислювальні технології моделювання багатокомпонентної адсорбції газів в нанопористих системах зі зворотніми впливами для класів нелінійних ізотерм адсорбції типу Ленгмюра.

7. Обґрунтовані і розвинуті підходи побудови узагальнених нелінійних рівнянь рівноваги адсорбції Ленгмюра. Реалізовані ефективні схеми розпаралелювання та декомпозиції нелінійних моделей.

7. Запропоновані математичні моделі адсорбції в напівобмеженому неоднорідному нанопористому середовищі і отриманий аналітичний розв'язок

в узагальненому вигляді описують впливи неоднорідностей, спричиненими розподіленими складовими початкових та граничних концентрацій адсорбтиву у газовій фазі та нанопорах на кожен окремий шар середовища.

8. Побудовані високошвидкісні аналітичні розв'язки математичних моделей з використанням операційного методу Гевісайда та реалізації рекурентних алгоритми побудови матриць впливу Коші, що забезпечує ефективне розпаралелювання обчислювальних процесів для багатоядерних комп'ютерів та підвищення швидкодії обчислень. Це дозволяє будувати концентраційні профілі адсорбтиву в макро та нанопорах неоднорідного  $n+1$ -складового середовища, здійснювати комплексний аналіз внутрішньої кінетики масопереносу, проектувати та досліджувати різні нестаціонарні режими адсорбційного масопереносу для багатоскладових адсорбційних середовищ з різними фізико-хімічними характеристиками.

## Список використаних джерел

1. Казаринов Р. Ф. О возможности усиления электромагнитных волн в полупроводниках со сверхрешеткой / Р. Ф. Казаринов, Р. А. Сурис // ФТП. – 1972. – Т. 6, № 7. – С. 1359 - 1365.
2. Казаринов Р. Ф. К теории электрических свойств полупроводников со сверхрешеткой / Р. Ф. Казаринов, Р. А. Сурис // ФТП. – 1973. – Т. 7, № 3. – С. 488 - 499.
3. Faist J. Quantum Cascade Laser / J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco [et al.] // Science. – 1994. – V. 264, № 5158. – P.533 - 556.
4. Faist J. High-power long wavelength ( $\lambda \sim 11,5 \mu\text{m}$ ) quantum cascade lasers operating above room temperature / J. Faist, C. Sirtori, F. Capasso [et al.] // IEEE Photon. Technol. Lett. – 1998. – V. 10, № 8. – P. 1100 - 1102.
5. Rochat M. Far-infrared ( $\lambda = 88 \mu\text{m}$ ) electroluminescence in a quantum cascade structure / M. Rochat, J. Faist, M. Beck [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1998. – V. 73, № 25. – P. 3724 - 3727.
6. Sirtori C. GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantum Cascade Lasers / C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1998. – V. 73, №24. – P. 3486 - 3489.
7. Hofstetter D. Surface-emitting  $10.1 \mu\text{m}$  quantum-cascade distributed feedback lasers / D. Hofstetter, J. Faist, M. Beck and U. Oesterle // Appl. Phys. Lett. – 1999. – V. 75, № 24. – P. 3724 - 3727.
8. Sirtori C. Low-loss Al-free waveguides for unipolar semiconductor lasers / C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2004. – V. 75, № 25. – P. 3911 - 3914.
9. Sirtori C. Influence of DX Centers on the Performance of Unipolar Semiconductor Lasers Based GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  / C. Sirtori, S. Barbieri, P. Kruck [et al.] // IEEE Photon. Technol. Lett. – 1999. – V. 11, № 9. – P. 1090 - 1092.

10. Hofstetter D. Measurement of semiconductor laser gain and dispersion curves utilizing Fourier transforms of the emission spectra / D. Hofstetter, J. Faist // IEEE Photon. Technol. Lett. – 1999. – V. 11, № 11. – P. 1372 - 1374.
11. Müller A. Electrically tunable, room-temperature quantum-cascade lasers / A. Müller, M. Beck J. Faist [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1999. – V. 75, № 11. – P. 1509 - 1512.
12. Blaser S. Room-temperature, continuous-wave, single-mode quantum-cascade lasers at  $\lambda \approx 5.4 \mu\text{m}$  / S. Blaser, D. A. Yarekha, L. Hvozdar [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2004. – V. 86, № 4. – P. 041109-1 - 041109-3.
13. Wittmann A. Room temperature, continuous wave operation of distributed feedback quantum cascade lasers with widely spaced operation frequencies / A. Wittmann, M. Giovannini, J. Faist [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2006. – V. 89, № 14. – P. 141116-1 - 141116-3.
14. Mohan A. Room-temperature continuous-wave operation of an external-cavity quantum cascade laser / A. Mohan, A. Wittmann, A. Hugi [et al.] // Opt. Lett. – 2007. – V. 32, № 19. – P. 2792 - 2794.
15. Geiser M. Strong light-matter coupling at terahertz frequencies at room temperature in electronic LC resonators / M. Geiser, C. Walther, G. Scalari [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2010. – V. 97, № 19. – P. 191107-1 - 191107-3.
16. Bismuto A. High power Sb-free quantum cascade laser emitting at  $3.3 \mu\text{m}$  above 350 K / A. Bismuto, M. Beck and J. Faist // Appl. Phys. Lett. – 2011. – V. 98, № 19. – P. 191104-1 - 191104 -3.
17. Tombez L. Frequency noise of free-running  $4.6 \mu\text{m}$  distributed feedback quantum cascade lasers near room temperature / L. Tombez, J. Di Francesco, S. Schilt [et al.] // Opt. Lett. – 2011. – V. 36, № 16. – P. 3109 - 3111.
18. Geiser M. Room temperature terahertz polariton emitter / M. Geiser, G. Scalari, F. Castellano, M. Beck and J. Faist // Appl. Phys. Lett. – 2012. – V. 104, № 14. – P. 141118-1 - 141118 -4.

19. Hofstetter D. Quantum-cascade-laser structures as photodetectors / D. Hofstetter, M. Beck and J. Faist // Appl. Phys. Lett. – 2002. – V. 81, № 15. – P. 2683 - 2685.
20. Scalari G. A THz quantum cascade detector in a strong perpendicular magnetic field / G. Scalari, M. Graf, D. Hofstetter [et al.] // Semicond. Sci. Technol.. – 2002. – V. 21, № 12. – P. 1743 - 1746.
21. Giorgetta F. R. 16.5  $\mu\text{m}$  quantum cascade detector using miniband transport / F. R. Giorgetta, E. Baumann, M. Graf [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2007. – V. 90, № 23. – P. 231111-1 - 231111 -3.
22. Giorgetta F. R. Short wavelength (4  $\mu\text{m}$ ) quantum cascade detector based on strain compensated InGaAs/InAlAs / F. R. Giorgetta, E. Baumann, R. Théron [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2008. – V. 92, № 12. – P. 121101-1 - 121101 -3.
23. Schneider H. Room-temperature midinfrared two-photon photodetector / H. Schneider, H. C. Liu, S. Winnerl [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2008. – V. 93, № 10. – P. 101114-1 - 101114 -3.
24. Diehl L. Characterization and modeling of quantum cascade lasers based on a photon-assisted tunneling transition / L. Diehl, M. Beck, J. Faist [et al.] // IEEE J. Quantum Electron. – 2001. – V. 37, № 3. – P. 448 - 455.
25. Willenberg H. Intersubband gain in a Bloch oscillator and quantum cascade laser / H. Willenberg, G. H. Döhler and J. Faist // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67, № 8. – P. 085315-1 - 080315 -10.
26. Scalari G. Far-infrared ( $\lambda \sim 87 \mu\text{m}$ ) bound-to-continuum quantum-cascade lasers operating up to 90 K / G. Scalari, L. Ajili, J. Faist [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2003. – V. 82, № 19. – P. 3165 - 3167.
27. Sirtori C. The quantum cascade laser. A device based on two-dimensional electronic subbands / C. Sirtori, J. Faist, F. Capasso and A. Y. Cho // Pure. Appl. Opt. - 1998. – V. 7, № 2. – P. 373 - 381.
28. Голант Е. И. Прохождение электронов через потенциальные барьеры в высокочастотных полях // Е. И. Голант, А. Б. Пашковский, А. С. Тагер // ФТП. – 1994. – Т. 28, №5. – С. 740 - 751.

- 29.Геельвич Э. А. Лазер на межзонных переходах в квантовых ямах с когерентным транспортом электронов / Э. А. Геельвич, А. Б. Пашковский, Е. И. Голант // Письма в ЖТФ. – 2002. – Т. 28, №23. – С. 1 - 8.
- 30.Елесин В. Ф. Когерентный лазер на двухъямной структуре / В. Ф. Елесин, А. В. Цуканов // ФТП. – 2000. – Т. 34, №11. – С. 1404 - 1407.
- 31.Елесин В. Ф. Высокочастотные свойства двухямных наноструктур / В. Ф. Елесин, И. Ю. Катеев // ФТП. – 2008. – Т. 42, №5. – С. 586 - 590.
- 32.Ремнев М. А. Влияние спейсерных слоев на вольт-амперные характеристики резонансно-туннельного диода / М. А. Ремнев, И. Ю. Катеев, В. Ф. Елесин // ФТП. – 2010. – Т. 44, №8. – С. 586 - 590.
- 33.Dupont E. Simplified density-matrix model applied to three-well terahertz quantum cascade lasers / E. Dupont, S. Fatholouloumi, and H. C. Liu // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 81, № 20. – P. 205311-1 - 205311 -10.
- 34.Ткач Н. В. Плоские двухбарьерные резонансно-туннельные структуры: резонансные энергии и резонансные ширины квазистационарных состояний электрона / Н. В. Ткач, Ю. А. Сети // ФТП. – 2009. – Т. 43, №10. – С. 1346 - 1355.
- 35.Ткач М. В. Метод S-матриці в теорії резонансних енергій і ширин квазістаціонарних станів електрона у несиметричній двобар'єрній резонансно-тунельній структурі / М. В. Ткач, Ю. О. Сеті // УФЖ. – 2009. – Т. 54, № 6. – С. 611 - 620.
- 36.Blaser S. Long-wavelength ( $\lambda \sim 10,5 \mu\text{m}$ ) quantum cascade lasers based on a photon-assisted tunneling transition in strong magnetic field. / S. Blaser, L. Diehl, M. Beck, J. Faist // Physica E. – 2000 – V. 7, № 1-2. – P. 33 - 36.
- 37.Dubrovskii Yu.V. Electron tunneling through single-barrier heterostructures in a magnetic field. / Yu. V. Dubrovskii, Yu. N. Khanin [et al.] // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50, № 7. – P 4897 - 4900.
- 38.Серов А. Ю. Резонансное туннелирование через квантовую яму с двумя барьерами в поперечном магнитном поле / А. Ю. Серов, Г. Г. Зегря //

- ЖЭТФ. – 2004. – Т. 126, № 1. – С. 170 - 180.
39. Belle G. Measurement of the miniband width in a superlattice with interband absorption in a magnetic field parallel to the layers. / G. Belle, G. C. Maan // Solid State Commun. – 1985. – V. 56, № 1. – P. 65 - 88.
40. Chung S. K. The effect on currents of anticrossings in the energy spectrum in quantum wells under crossed electric and magnetic fields / S. K. Chung O. Olendski // Semicond. Sci. Technol. – 1997. – V. 12, № 7. – P. 788 - 795.
41. Elagoz S. Double quantum well electronic energy spectrum within a tilted magnetic field / S. Elagoz, H. Elagoz, H. Sari, Y. Ergün, P. Karasu // Superlattices and Microstr. – 1999. – V. 26, № 5. – P. 300 - 305.
42. Hung K-M. Transfer-matrix theory of the energy levels and electron tunneling in heterostructures under an in-plane magnetic field. / K-M. Hung and G. Y. Wu // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 45, № 7. – P. 3461 – 3464.
43. Yong G. Quantum magnetotransport of electrons in double-barrier resonant-tunneling structures. / G. Yong and Y-C. Li, X-G. Kong and C-W. Wei // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50, № 23. – P. 17249 – 17255.
44. Puertolas B., Navarro M.V., Lopez J.M., Murillo R., Mastral A.M., Garcia T. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite. Separation and Purification Technology. 2012. Vol. 86 P. 127–136.
45. Barrer, R.M., Diffusion and Flow in Porous Zeolite, Carbon or Ceramic Media, Characterization of Porous Solids, Society of Chemical Industry, London, 1979
46. Kanellopoulos N.K. Nanoporous materials: advanced techniques for characterization, modeling, and processing. London: CRC Press, 2011. 564 p.
47. Chen, N.Y., T.F. Degnan and M.C. Smith, Molecular Transport and Reaction in Zeolites: Design and Application of Shape Selective Catalysis, V.C.H. Weinheim, New York, (1994).
48. R. de Boer, Contemporary progress in porous theory, Apl. Mech. Rev. 53 (12), 323-369 (2000)
49. Hammond K.D., Conner W.C. Chapter One- Analysis of Catalyst Surface Structure by Physical Sorption. Advances in Catalysis 2013, Vol. 56, 1-101.

50. Krishna R., Van Baten J.M. Investigating the non-idealities in adsorption of CO<sub>2</sub> -bearing mixtures in cation-exchanged zeolites. *Separation and Purification Technology*. 2018. Vol. 206. P. 208-217.
51. Krishna R. Thermodynamically Consistent Methodology for Estimation of Diffusivities of Mixtures of Guest Molecules in Microporous Materials. *ACS Omega* 2019, Volume 4(8), 13520-13529.
52. Kärger J. and Ruthven D. *Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids*. Hoboken: John Wiley & Sons, New York, 1992 p
53. Kärger J., Ruthven D., Theodorou D. *Diffusion in Nanoporous Materials*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2012. 902 p.
54. Langmuir I.-J. *Am. Chem. Sce.* 54, 2798 (1932)
55. P. N'Gokoli-Kekele, M. A. Spiringuel-Huet, J. Fressard. An Analytical Study of Molecular Transport in Zeolite Bed. *Adsorption*. (Kluwer), 8, 35-44, (2002).
56. Leclerc S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and slice selection procedure. *Catalysis Today*, 2012. Vol.187, N 1. P. 104-107.
57. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5. *Catalysis Today*. 2008. Vol. 139, N 3. P. 234–240.
58. Petryk M., Leclerc S., D. Canet, Sergienko I.V., Deineka V.S., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite bed: NMR and slice procedure, modelling and identification of parameters. *J. Phys. Chem. C*. 2015. Vol. 119, N 47. P. 26519-26525. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b07974>.
59. Sergienko I.V., Petryk M.R., Leclerc S., Fraissard J. Highly efficient methods of the identification of competitive diffusion parameters in heterogeneous media of nanoporous particles. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2015. Vol. 51, N 4. P. 529-546.
60. Petryk M.R., Boyko I. V., Khimich O. M., Petryk M. M. High-Performance Supercomputer Technologies of Simulation of Nanoporous Feedback Systems



- for Adsorption Gas Purification. Cybernetics and Systems Analysis, Vol. 56, No. 5, 2020, 835–847.
61. Petryk M.R., Boyko I.V., Khimich O. M., Petryk M. M. High-performance supercomputer technologies of simulation and identification of nanoporous systems with feedback for n-component competitive adsorption ... Cybernetics and Systems Analysis, Vol. 57, No.2, 2021. P. 170–183.
62. Petryk M., Ivanchov M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Competitive Adsorption and Diffusion of Gases in a Microporous Solid. In the book "Zeolites – New Challenges". Margeta K., Farkas. (Eds). London: IntecOpen, UK. P.13-31. (2020).
63. Сергієнко І.В., Петрик М.Р., Хіміч О.М., Кане Д., Михалик Д.М., Леклерк С., Фресар Ж. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури / Національна академія наук України, Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова. – 2014. –210с.
64. Хіміч О.М., Петрик М.Р., Михалик Д. М., Бойко І.В., Попов О.В., Сидорук В.А. Методи математичного моделювання та ідентифікації складних процесів і систем на основі високопродуктивних обчислень. Київ: Вид-во НАН України, 2019. 190 с.
65. Petryk M., Khimich A., Petryk M.M., Fraissard J. Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel. Fuel. 2019. Vol. 239, P. 1324–1330. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.10.134>.
66. Petryk M., Khimich A., Petryk M.M.. Simulation of Adsorption and Desorption of Hydrocarbons in Nanoporous Catalysts of Neutralization Systems of Exhaust Gases Using Nonlinear Langmuir Isotherm. Journal of Automation and Information Sciences, Vol. 50 (10), 18-33 (2018)
67. Mykhalyk D., Petryk M, Petryk M.M., Petryk O., Mudryk I. Mathematical Modeling of Hydrocarbons Adsorption in Nanoporous Catalyst Media using Nonlinear Langmuir's Isotherm using Activation Energy. Proc. 9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies

- (ACIT'2019) (5-7 June 2019, Budejovice, Czech Republic). Budejovice, 2019. P. 72-75.
- 68.Lavrentiev M.A., Shabat B.V. Methods of theory of functions of a complex variable. M.: Nauka, 1973, 736 p.
- 69.Doetsch G. Handbuch der Laplace-Transformation, 3 vols., Birkhäuser, Basel 1956.
- 70.Ленюк М.П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. — Київ: Наукова думка, 2000.— 372с.
- 71.Nemytskii V.V., Stepanov V.V. Qualitative Theory of Differential Equations. New York: Dover Publications, Inc. (New Edition), 1990. 552 p.

**ДЛЯ НОТАТОК**

[illegible]

**ПЕТРИК М.Р.  
БОЙКО І.В.**

**МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ  
СКЛАДНИХ ПРОЦЕСІВ В НАНОСТРУКТУРАХ  
І НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ**  
(на основі високопродуктивних обчислень)

**Монографія**

Формат 60x90/16. Обл. вид. арк. 3,06. Тираж 300 прим. Зам. № 3484.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя.

46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56.

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4226 від 08.12.11.