

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КАНТОРОВИЧА ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО АНАЛИЗА МОДЕЛЕЙ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР

Гусев Александр Александрович<sup>1</sup>, Ростовцев Виталий Александрович<sup>2</sup>,  
Виницкий Сергей Ильич<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник;  
Объединенный институт ядерных исследований,  
Лаборатория Информационных технологий;  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6;  
e-mail: gooseff@jinr.ru.

<sup>2</sup>Доцент института САУ;  
ГОУ ВПО «Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,  
Институт системного анализа и управления;  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;  
e-mail: rost@jinr.ru.

<sup>3</sup>Доктор физико-математических наук, профессор;  
Объединенный институт ядерных исследований,  
Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова;  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6;  
e-mail: vinitzky@theor.jinr.ru.

В приближении эффективной массы динамика квантоворазмерных полупроводниковых наноструктур, таких как квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки описываются многомерной краевой задачей для уравнений шрёдингеровского типа. Для решения таких задач разработаны символьно-численные алгоритмы, реализующие вычислительную схему, основанную на обобщении метода Канторовича – редукции к набору краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Эффективность алгоритмов продемонстрирована анализом спектральных и оптических характеристик моделей аксиально-симметричных сфероидальных квантовых точек с различными ограничивающими потенциалами.

**Ключевые слова:** Модели квантоворазмерных наноструктур, метод Канторовича, символьно-численные алгоритмы, сфероидальные квантовые точки, коэффициент фотоабсорбции.

## APPLICATIONS OF KANTOROVICH METHOD FOR COMPUTER ANALYSIS OF MODELS OF QUANTUM-DIMENSIONAL NANOSTRUCTURES

Gusev Alexander<sup>1</sup>, Rostovtsev Vitaly<sup>2</sup>, Vinitzky Serguei<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Candidate of Science in Physics and Mathematics, senior researcher;  
Join Institute for Nuclear Research,  
Laboratory of Information Technologies;  
141980, Dubna, Moscow reg., Joliot-Curie, 6;  
e-mail: gooseff@jinr.ru.

<sup>2</sup>Associate professor of Institute of system analysis and management;  
Dubna International University of Nature, Society, and Man,  
Institute of system analysis and management;  
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;  
e-mail: rost@jinr.ru.

<sup>3</sup>Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor;  
Join Institute for Nuclear Research,  
Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics;  
141980, Dubna, Moscow reg., Joliot-Curie, 6;  
e-mail: vinitzky@theor.jinr.ru.

*Within the effective mass approximation the description of dynamics of quantum-dimensional semiconductor nanostructures, e.g., quantum wells, quantum wires, and quantum dots, reduced to a multidimensional boundary-value problem for Schrödinger-type equations. For solving such problems we elaborate the symbolic-numerical algorithms realizing a computational scheme based on the generalization of Kantorovich method, reducing the problem to a set of boundary problems for second-order ordinary differential equations. The efficiency of the algorithms was demonstrated by analysis of spectral and optical characteristics of axially-symmetric spheroidal quantum dots with different confining potentials.*

**Keywords:** Models of quantum-dimensional nanostructures, Kantorovich method, symbolic-numerical algorithms, spheroidal quantum dots, photoabsorption coefficient.

## Введение

Создание нульмерных нанобъектов – полупроводниковых квантовых точек (КТ) – представляет интерес как для фундаментальной физики, так и для потенциальных применений в электронных и оптоэлектронных приборах [1]. Самоорганизующиеся квантовые точки могут быть получены на основе многих полупроводниковых материалов. Большинство исследований посвящено выращиванию и исследованию структурных и оптических свойств квантовых точек. Конечной целью этих исследований являлось создание лазеров и фотодиодов для спектрального диапазона 1.1-1.3 мкм, перспективного для задач волоконно-оптической связи. В последние годы возник также интерес к использованию КТ для биологии и медицины.

О результатах по выращиванию InSb/InAs квантовых точек методом жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) и структурных исследований их характеристик методами сканирующей зондовой микроскопии и атомно-силовой микроскопии сообщено в работе [1]. На рис. 1 приведены результаты исследований морфологии рельефа поверхности образца МРЗ/1. Обнаруженные на поверхности нанобъекты характеризуются средним значением высоты  $H = 3.4 \pm 1.9$  нм, средним радиусом  $R = 27.2 \pm 7.5$  нм, число объектов в кадре  $N = 102$ , что соответствует средней плотности  $n = 1010$  см<sup>-2</sup>. Здесь следует отметить, что по данным атомно-силовой микроскопии (АСМ) точно определяются высота и поверхностная плотность объектов, а размер объектов в плоскости, как правило, завышен из-за инструментального эффекта. На рис. 2 приведены результаты исследования проводимости нанобъектов, верифицируемой также по коэффициенту фотоабсорбции. Результаты СЗМ исследований показывают, что в процессе роста удалось создать достаточно плотный и однородный по свойствам ансамбль квантово-размерных объектов, обладающих по сравнению с матрицей более высокой проводимостью. Откуда можно заключить, что методом ЖФЭ удастся создать квантовые точки InSb на поверхности InAs.

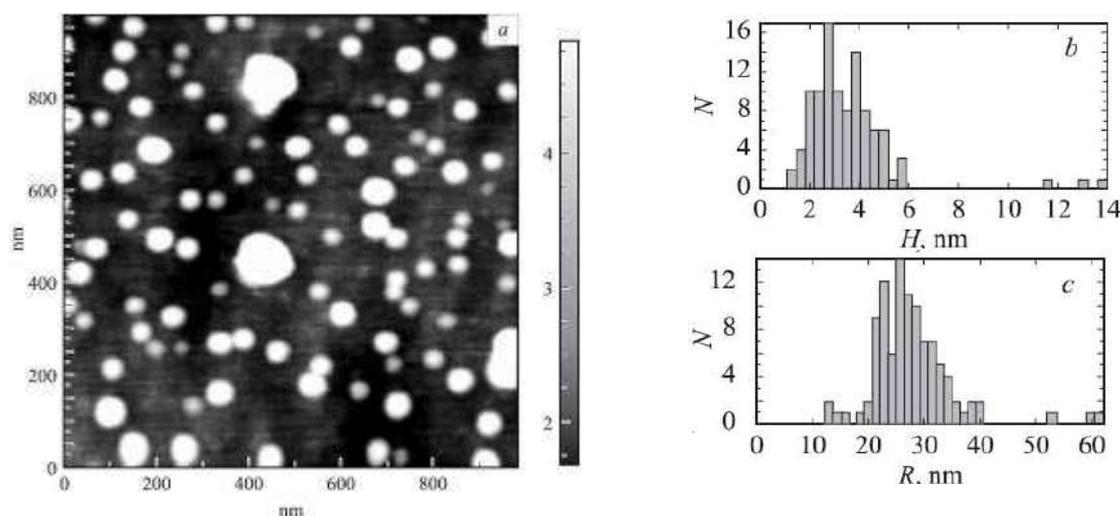


Рис. 1. Топография участка поверхности для образца МРЗ/1 (а) площадью 1 мкм<sup>2</sup>, полученная методом бесконтактной атомно-силовой микроскопии [1]. Распределение нанобъектов InSb/InAs по высоте  $H$  (b) и радиусу  $R$  (c).  $N$  – число частиц

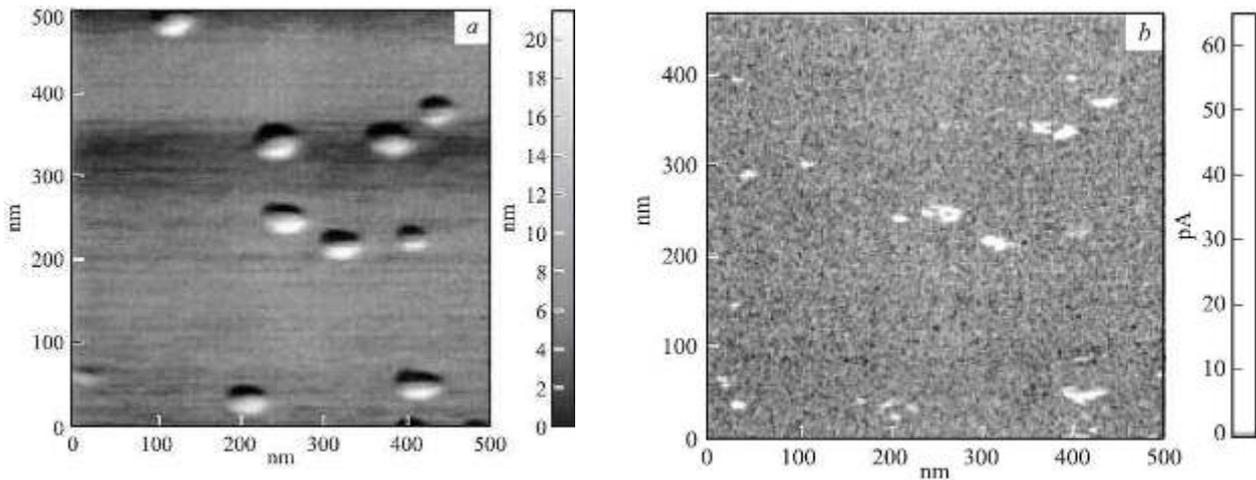


Рис. 2. Проводимость нанобъектов InSb, выращенных на подложке InAs. Топография участка поверхности для образца МРЗ/1 (а) площадью 0.5 x 0.5 мкм<sup>2</sup> и карта локальной проводимости этого же участка (b), полученные методом контактной атомно-силовой микроскопии [1]

В приближении эффективной массы математическое описание динамики моделей таких низкоразмерных наноструктур как квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки приводится к краевой задаче для уравнений Шрёдингера с ограничивающими потенциалами по одной-, двум- и трём пространственным переменным, соответственно. Для решения такого класса задач разработана новая универсальная вычислительная схема, основанная на обобщении метода Канторовича – приведение исходной задачи к набору краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка [2]. Для реализации схемы были разработаны символьно-численные алгоритмы и проблемно-ориентированные комплексы программ [3-10]. Метод учитывает и специфическую геометрию структуры и форму ограничивающего потенциала при построении моделей низкоразмерных наноструктур во внешних полях. Вычислительная эффективность метода продемонстрирована примерами, включающими анализ моделей ионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атомов антиводорода в однородном магнитном поле [4, 5, 8], осевого каналирования частиц в кристалле, подобных квантовым проволокам [9], аксиально-симметричных квантовых ям [7] и сфероидальных квантовых точек с различными потенциалами ограничения [6].

В настоящей работе представлена общая схема решения краевых задач для уравнения Шрёдингера с аксиально-симметричными ограничивающими потенциалами методом Канторовича. Рассмотрены формулировки краевых задач для моделей сфероидальных КТ в адиабатическом приближении, в рамках которого приближенные решения находятся в аналитическом виде методом теории возмущений. Эффективность разработанного метода, символьно-численных алгоритмов и программ решения краевых задач продемонстрирована анализом спектральных характеристик и коэффициента фотоабсорбции моделей аксиально-симметричных сфероидальных квантовых точек с различными ограничивающими потенциалами.

### 1. Постановка задачи

В приближении эффективной массы уравнение Шрёдингера для медленной огибающей волновой функции электрона  $\Psi^e(\vec{r}_e)$  (или дырки  $\Psi^h(\vec{r}_h)$ ), находящегося под действием магнитного поля, квантовой точки, квантовой проволоки и квантовой ямы имеет вид [2, 6-8]:

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \left( \hat{p} - \frac{q_1}{c} \vec{A} \right)^2 + q_1 \vec{F} \vec{r} + U_{conf}(\vec{r}) - \frac{q}{\kappa |\vec{r}|} \right\} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}). \quad (1.1)$$

Здесь  $E$  – энергия системы,  $|\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ,  $\hat{p} = -i\hbar \nabla_{\vec{r}}$  – импульс частицы,  $q = -q_1 q_2 e$ ,  $q_1 = -e$  – кулоновский заряд электрона,  $q_2 e$  – кулоновский заряд примесного центра,  $\kappa$  – диэлектрическая

проницаемость,  $\mu_e = \beta m_e$  – эффективная масса электрона, (например, для GaAs:  $q = 1; \kappa = 13.18$ ,  $\beta_e = 0.067$ ,  $\beta_h = \beta_e/12$ ,  $a_e = 10.2 \text{ нм}$ ,  $E_R^e = 5.27 \text{ мэВ}$ ,  $a_h = 1.5 \text{ нм}$ ,  $E_R^h = 49 \text{ мэВ}$ ,  $\mu_e = 0.067 m_0$ ,  $\mu_h = \mu_e / 0.12 = 0.558 m_0$ ),  $U_{conf}(\vec{r})$  – ограничивающий потенциал,  $\vec{A} = \frac{1}{2}[\vec{H}, \vec{r}]$  – векторный потенциал,  $H = \gamma H_0$ ,  $H_0 = \hbar \omega_c / (2E_R^e)$ ,  $\omega_c = e\hbar / (\mu c)$  циклотронная частота,  $F = \gamma_F F_0$  – напряжённость электрического поля,  $F_0 = 2e / a_e^2 = ea_e / E_R^e$ . Ниже ограничимся случаем  $H = 0$ ,  $F = 0$ ,  $q_2 = 0$  и будем использовать приведённые атомные единицы.

При моделировании используется параболический потенциал ограничения (Модель А), который для сфероидальной КТ имеет вид:

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

Эта задача точно решается в декартовой и цилиндрической системах координат (ЦСК), и в случае сферической КТ – также и в сферической системе координат (ССК). Для сравнения на рис. 3 представлены контурные линии волновых функций сферического осциллятора в ЦСК и ССК.

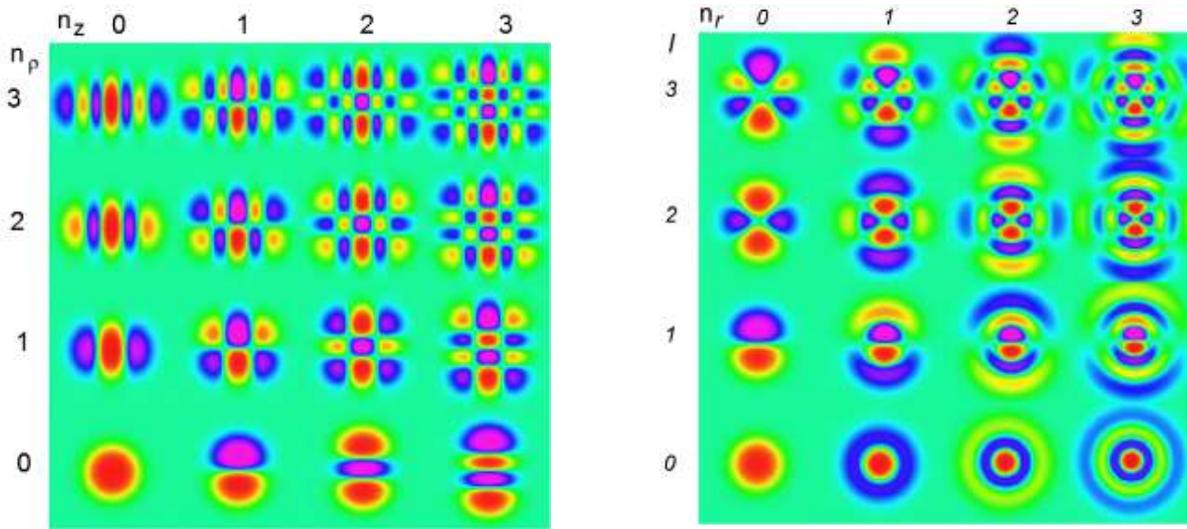


Рис. 3. Контурные линии первых нескольких собственных функций эквидистантного дискретного спектра  $E = 2n_r + l + 3/2 = 2n_r + n_z + |m| + 3/2$  сферического осциллятора (модель А) в плоскости  $xz$ , классифицированные при  $m = 0$  цилиндрическими квантовыми числами  $n_r = 0, 1, 2, 3$ ;  $n_z = 0, 1, 2, 3$ , (слева) и сферическими квантовыми числами  $n_r + l = 1, 2, 3, 4$ ;  $l = 0, 1, 2, 3$  (справа)

Для сравнения используем также модели с потенциалом  $U(\vec{r})$  потенциальной ямы (Модель Б):

$$U(\vec{r}) \equiv U^B(\vec{r}) = \{0, S(\vec{r}) < 0; U_0, S(\vec{r}) \geq 0\},$$

ограниченной поверхностью  $S(\vec{r}) = 0$  со стенками конечной или бесконечной высоты  $U_0 \gg 1$  и диффузный потенциал (Модель В):

$$U(\vec{r}) \equiv U^B(\vec{r}) = U_0 (1 - (1 + \exp(S(\vec{r})/s))),$$

где  $s$  – параметр диффузности. Для сфероидальных КТ,  $S(\vec{r}) = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} - 1$  зависит от параметров  $a$  и  $c$  – полуосей сфероид.

Уравнение (1.1) при фиксированных значениях магнитного квантового числа  $m = 0, \pm 1, \dots$  имеет вид:

$$\left( \frac{1}{g_{3s}(x_s)} \hat{H}_2(x_f; x_s) + \hat{H}_1(x_s) - 2E \right) \Psi(x_f, x_s) = 0, \tag{1.2}$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{1}{g_{1f}(x_f)} \frac{\partial}{\partial x_f} g_{2f}(x_f) \frac{\partial}{\partial x_f} + \hat{V}_f(x_f, x_s), \quad \hat{H}_1 = -\frac{1}{g_{1s}(x_s)} \frac{\partial}{\partial x_s} g_{2s}(x_s) \frac{\partial}{\partial x_s} + \hat{V}_s(x_s),$$

где  $\hat{H}_2 \equiv \hat{H}_2(x_f; x_s) = g_{3s}(x_s) H_2(x_f; x_s)$  и  $\hat{H}_1 \equiv \hat{H}_1(x_s) = H_1(x_s)$  – гамильтонианы быстрой и медленной подсистем в подходящей системе координат [2, 6]. Решение краевой задачи для уравнения (2) с подходящими краевыми условиями ищем в виде разложения:

$$\Psi_v^{Em}(x_f, x_s) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j^m(x_f; x_s) \chi_j^{(v)}(x_s, E) \tag{1.3}$$

по собственным функциям  $\hat{\Phi}_i(x_f; x_s)$  задачи на собственные значения для быстрой подсистемы при каждом значении параметра  $x_s$  из интервала  $x_s \in (x_s^{\min}, x_s^{\max})$  (или на сетке узлов  $x_s \in \Omega_1^h(x_s)$ ):

$$\{\hat{H}_2(x_f; x_s) - \hat{E}_i(x_s)\} \hat{\Phi}_i(x_f; x_s) = 0, \quad \langle \hat{\Phi}_i | \hat{\Phi}_j \rangle = \int_{x_f^{\min}(x_s)}^{x_f^{\max}(x_s)} \hat{\Phi}_i(x_f; x_s) \hat{\Phi}_j(x_f; x_s) g_{1f}(x_f) dx_f = \delta_{ij}. \tag{1.4}$$

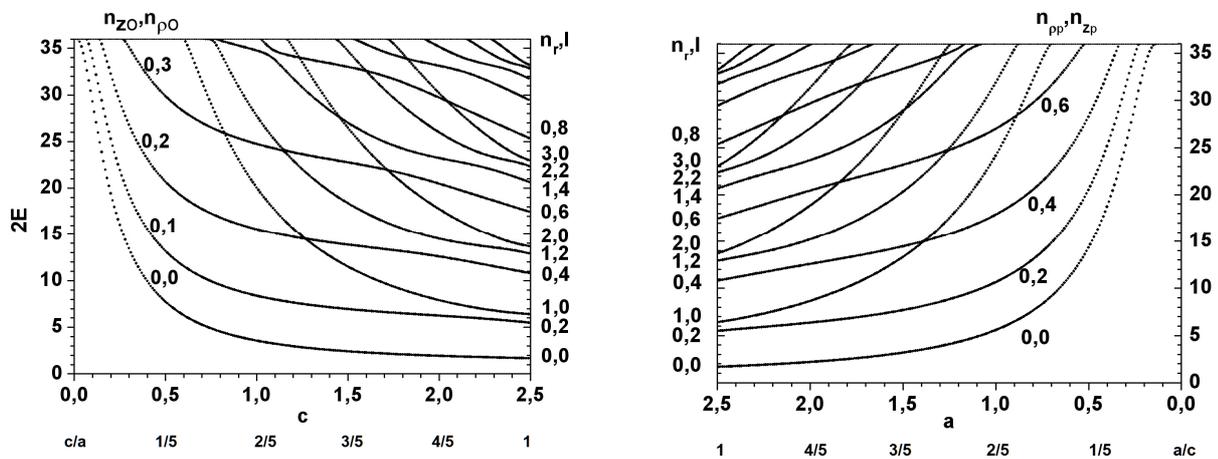


Рис. 4. Собственные значения  $2E$  неэквидистантного дискретного спектра сплюснутой (слева) и вытянутой (справа) сфероидальной КТ (модель В,  $U_0 = 18, s = 0.1$ ) в плоскости  $xz$ , классифицированные при  $t=0$  цилиндрическими квантовыми числами  $[n = n_{z+1}, n_\rho]$  и  $[n = n_{\rho+1}, n_z]$  и при  $a = c = 2.5$  сферическими квантовыми числами ( $n = n_r + 1, l$ )

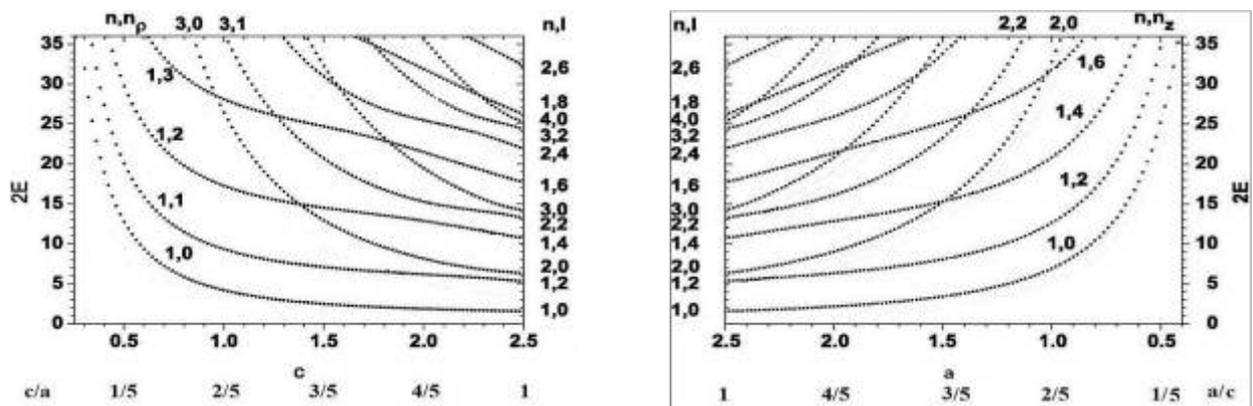


Рис. 5. Собственные значения нижней части неэквидистантного дискретного спектра сплюснутой (слева) и вытянутой (справа) сфероидальной КТ (модель Б потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками) в плоскости  $xz$ , классифицированные при  $t = 0$  цилиндрическими квантовыми числами  $[n = n_{z+1}, n_\rho]$  и  $[n = n_{\rho+1}, n_z]$  и при  $a = c = 2.5$  сферическими квантовыми числами ( $n = n_r + 1, l$ )

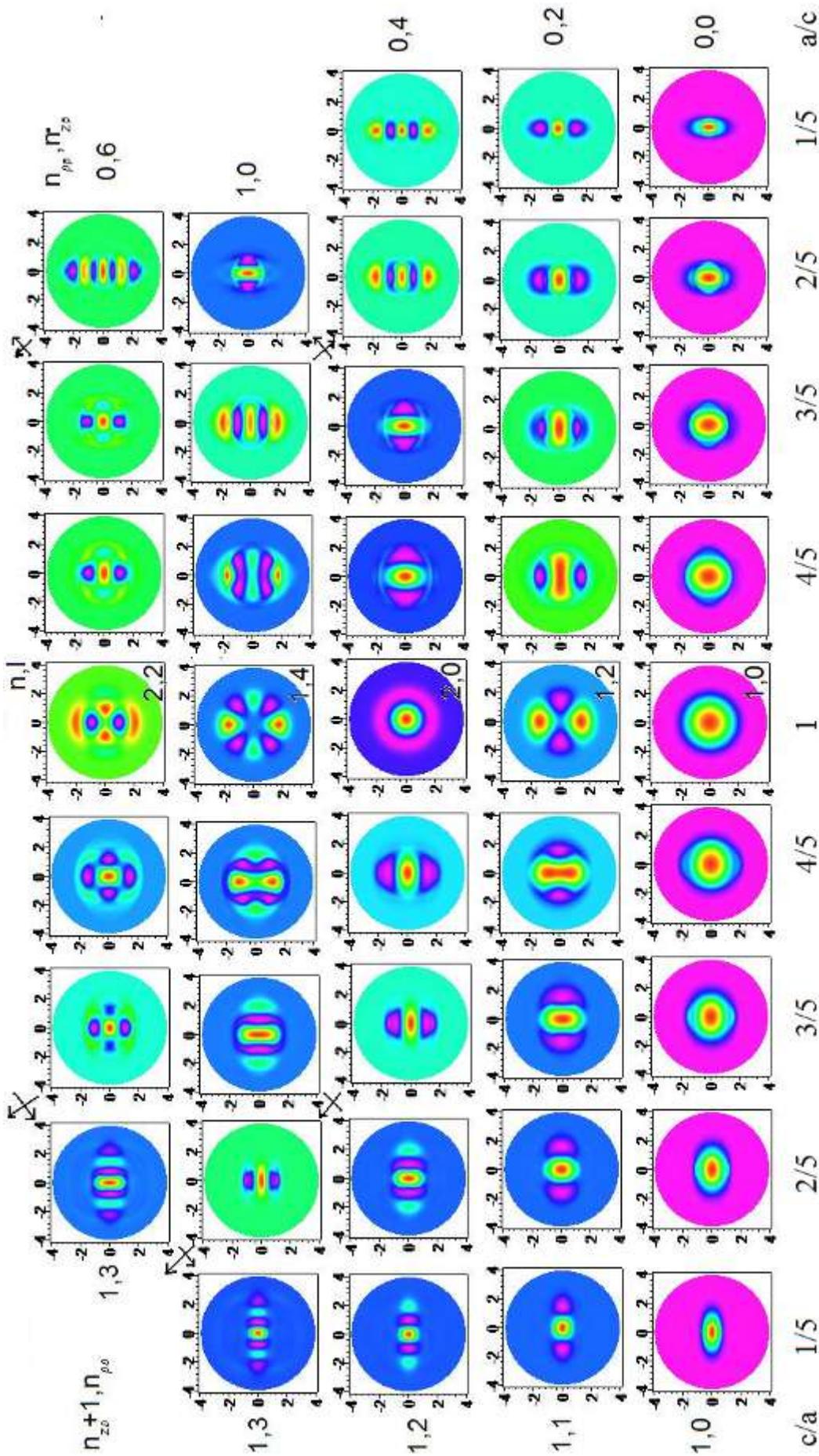


Рис. 6. Контурные линии первых нескольких собственных функций дискретного спектра сплюснутой ( $c = 0.5, 1, 1.5, 2, a = 2.5$ , слева) и вытянутой ( $a = 0.5, 1, 1.5, 2, c = 2.5$ , справа) сферической КТ (модель В,  $U_0 = 18, s = 0.1$ ) в плоскости  $xz$ , классифицированные при  $m = 0$  цилиндрическими квантовыми числами  $[n_{\rho}, n_z]$  и при  $a = c = 2.5$  сферическими квантовыми числами  $(n = n_r + 1, l)$ . Стрелками обозначена эволюция функций по параметру при пересечении собственных значений, представленных на рисунке 4

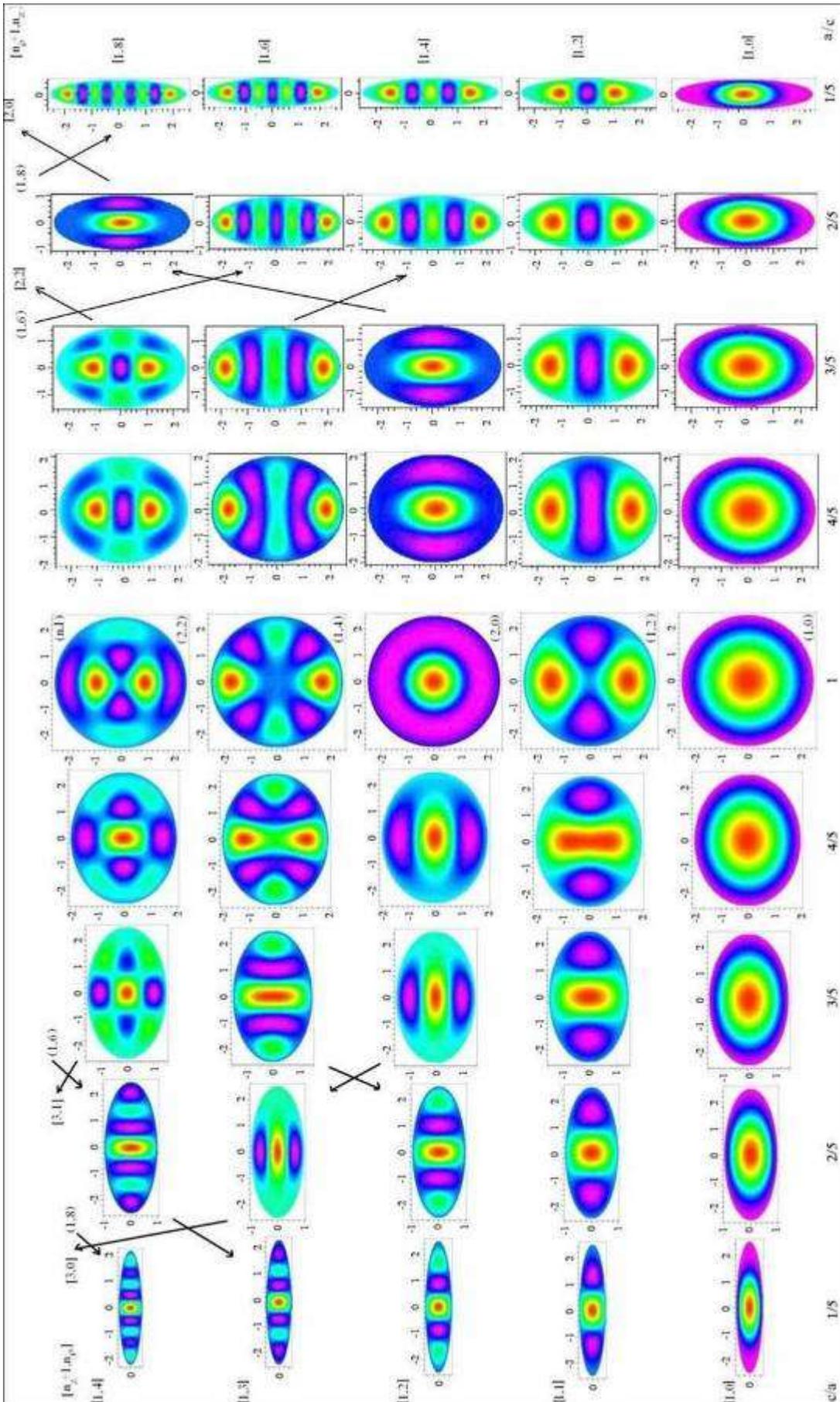


Рис. 7. Контурные линии первых нескольких собственных функций дискретного спектра сплюснутой ( $c = 0.5, 1, 1.5, 2, a = 2.5$ , слева) и вытянутой ( $a = 0.5, 1, 1.5, 2, c = 2.5$ , справа) сфероидальной ямы с бесконечно высокими стенками в плоскости  $xz$ , классифицированные при  $m=0$  цилиндрическими квантовыми числами  $[n_r, n_z]$  и при  $a = c = 2.5$  сферическими квантовыми числами ( $n = n_r + 1, l$ ).

Стрелками обозначена эволюция функций по параметру при пересечении собственных значений, представленных на рисунке 5

Здесь  $\hat{E}_1(x_s) < \dots < \hat{E}_{j_{\max}}(x_s) < \dots$  – искомый набор вещественных собственных значений (термов). Решения задачи (1.4) вычисляются программой ODPEVP [10]. Подставляя разложение (1.3) в уравнение (1.2) с учетом (1.4), получаем систему ОДУ для медленной подсистемы относительно неизвестных вектор-функций  $\chi^{(v)}(x_s, E) \equiv \chi^{(v)}(x_s) = (\chi_1^{(v)}(x_s), \dots, \chi_{j_{\max}}^{(v)}(x_s))^T$ :

$$\mathbf{H}\chi^{(v)}(x_s) = 2E_v \mathbf{I}\chi^{(v)}(x_s),$$

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

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

$$U_{ij}(x_s) = \frac{1}{g_{3s}(x_s)} \hat{E}_i(x_s) \delta_{ij} + \frac{g_{2s}(x_s)}{g_{1s}(x_s)} W_{ij}(x_s), \quad W_{ij}(x_s) = \int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} \frac{\partial \Phi_i(x_f; x_s)}{\partial x_f} \frac{\partial \Phi_j(x_f; x_s)}{\partial x_f} g_{1f}(x_f) dx_f,$$

$$Q_{ij}(x_s) = - \int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} \Phi_i(x_f; x_s) \frac{\partial \Phi_j(x_f; x_s)}{\partial x_f} g_{1f}(x_f) dx_f$$

вычисляются программой ODPEVP [10], а для модели Б сфероидальных КТ при  $U_0 \rightarrow +\infty$  вычисляются также в аналитическом виде [6]. Решения  $\chi^{(v)}(x_s)$  дискретного спектра  $2E$ :  $2E_1 < 2E_2 < \dots < 2E_v < \dots < 2U_{11}(x_s^{\max})$ , подчиняются подходящим краевым условиям при  $x_s = x_s^{\min}$ ,  $x_s = x_s^{\max}$  (см. [6]) и условиям ортонормировки:

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

Нижняя часть спектра и собственные функции сплюснутой и вытянутой сфероидальных КТ, вычисленные программой KANTBP 2.0 [3] для модели В и модели Б потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками приведены на рисунках 4-7. Из рисунков видна специфика эволюции собственных значений и собственных функций КТ, классифицированных сферическими и цилиндрическими квантовыми числами при переходе от сферической формы КТ к сильно сплюснутой или вытянутой сфероидальным формам КТ. Отметим, что с уменьшением малой полуоси собственные значения энергии монотонно возрастают, причем для вытянутой КТ быстрее, чем для сплюснутой КТ, демонстрируя эффект размерного квантования. Для модели В с диффузным потенциалом при приближении собственных значений энергии к границе перехода от дискретного спектра к непрерывному вместо точных пересечений собственных значений появляются квазипересечения, которые отсутствуют в чисто дискретном спектре модели Б потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками.

## 2. Краевые задачи для моделей сфероидальных КТ

В цилиндрических координатах краевая задача (КЗ) для модели ССКТ или ВСКТ в области  $\Omega = (\{\rho, z, \varphi\} | \frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} \leq 1)$ , ограниченной поверхностью  $S = (\{\rho, z, \varphi\} | \frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1)$ , для компоненты  $\Psi_t^{m\sigma}(\rho, z)$  функции  $\Psi_t(\rho, z, \varphi) = \Psi_t^{m\sigma}(\rho, z) \exp(im\varphi) / \sqrt{2\pi}$  при фиксированных магнитном квантовом числе  $m$  и чётности  $\sigma = \pm 1$ :  $\Psi_t^{m\sigma}(\rho, -z) = \sigma \Psi_t^{m\sigma}(\rho, z)$ , имеет вид (в приведённых атомных единицах энергии  $E_R^{e(h)} = \hbar^2 / (2\mu_{e(h)} (a_B^{e(h)})^2)$  и длины  $a_B^{e(h)} = \kappa \hbar^2 / (\mu_{e(h)} e^2)$  электрона (e) или дырки (h)):

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} - 2E_t^{m\sigma}\right) \Psi_t^{m\sigma}(\rho, z) = 0, \quad \int_{\Omega} |\Psi_t^{m\sigma}(\rho, z)|^2 \rho d\rho dz = 1, \quad (2.1)$$

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left( \rho \frac{\partial \Psi_i^{m\sigma}(\rho, z)}{\partial \rho} \delta_{0m} + \Psi_i^{m\sigma}(\rho, z)(1 - \delta_{0m}) \right) = 0, \quad \Psi_i^{m\sigma}(\rho, z)|_S = 0.$$

Решение КЗ (2.1) ищем в адиабатическом приближении разложения (1.3) для ССКТ и ВСКТ:

$$\Psi_{in_{\rho o}}^{m\sigma}(\rho, z) \approx B_i^\sigma(z; \rho) \chi_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}(\rho), \quad \Psi_{in_{z p}}^{m\sigma}(\rho, z) \approx B_i^m(\rho; z) \chi_{n_{z p}}^{(im\sigma)}(z).$$

Для ССКТ КЗ по быстрой переменной  $z$  при значении параметра  $\rho \in (0, a)$

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2E_i^\sigma(\rho) \right) B_i^\sigma(z; \rho) = 0, \quad \int_{z_{\min}(\rho)}^{z_{\max}(\rho)} |B_i^\sigma(z; \rho)|^2 dz = 1,$$

$$B_i^\sigma(z_{\min}(\rho); \rho) = B_i^\sigma(z_{\max}(\rho); \rho) = 0, \quad z_{\min}(\rho) = -c\sqrt{1 - \rho^2/a^2}, \quad z_{\max}(\rho) = c\sqrt{1 - \rho^2/a^2}$$

имеет счётный набор собственных значений  $\tilde{E}_{n_o}^\sigma(\rho)/E_R^{e(h)} \equiv 2E_i^\sigma(\rho)$ ,  $n_o = i = 1, 2, \dots$  и собственных функций  $B_i^\sigma(z; \rho)$ , зависящих от параметра  $\rho$ :

$$2E_i^\sigma(\rho) = 2E_i^{0\sigma} \frac{a^2}{a^2 - \rho^2}, \quad 2E_i^{0\sigma} = \frac{\pi^2 n_o^2}{4c^2} = \frac{\omega_{\rho; n_o}^2(c)a^2}{4}, \quad \omega_{\rho; n_o}(c) = \frac{\pi n_o}{ac},$$

$$B_i^\sigma(z; \rho) = \sqrt{\frac{2}{L(\rho)}} \sin\left(\frac{\pi n_o}{2} \left(\frac{z}{L(\rho)/2} - 1\right)\right), \quad L(\rho) = 2c\sqrt{1 - \rho^2/a^2},$$

где чётные решения  $\sigma = +1$  нумеруются нечётными  $n_o = n_{z_o} + 1 = 2i - 1$ , а нечётные решения  $\sigma = -1$  – чётными  $n_o = n_{z_o} + 1 = 2i$ . Решение  $\{E_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}, \chi_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}(\rho)\}$  КЗ по медленной переменной  $\rho$ , характеризуемое квантовым числом  $n_{\rho o} = 0, 1, \dots$ ,

$$\left( -\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + 2E_i^\sigma(\rho) - 2E_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)} \right) \chi_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}(\rho) = 0, \quad (2.2)$$

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left( \rho \frac{d \chi_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}(\rho)}{d\rho} \delta_{0m} + \chi_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}(\rho)(1 - \delta_{0m}) \right) = 0, \quad \chi_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}(a) = 0, \quad \int_0^a |\chi_{n_{\rho o}}^{(im\sigma)}(\rho)|^2 \rho d\rho = 1$$

находим в аналитическом виде по теории возмущений (ТВ), используя разложение  $2E_i^\sigma(\rho)$  в виде ряда по малому параметру  $\varepsilon = a^{-2}$ :

$$2E_i^\sigma(\rho) = \frac{\pi^2 n_o^2}{(2c)^2} + \frac{(\omega_{\rho; n_o}(c))^2}{4} \rho^2 + \sum_{j=1}^{j_{\max}} \frac{(\omega_{\rho; n_o}(c))^2 \rho^{2+2j}}{4} \varepsilon^j.$$

Для ВСКТ КЗ по быстрой переменной  $\rho$  при значениях параметра  $z \in (-c, c)$

$$\left( -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} - 2E_i^m(z) \right) B_i^m(\rho; z) = 0, \quad \int_0^{\rho_{\max}(z)} |B_i^m(\rho; z)|^2 \rho d\rho = 1,$$

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left( \rho \frac{dB_i^m(\rho; z)}{d\rho} \delta_{0m} + B_i^m(\rho; z)(1 - \delta_{0m}) \right) = 0, \quad B_i^m(\rho_{\max}(z); z) = 0,$$

$$\rho_{\max}(z) = a\sqrt{1 - z^2/c^2}$$

имеет счётный набор собственных значений  $\tilde{E}_{\rho p}^m(z)/E_R^{e(h)} \equiv 2E_i^m(z)$ ,  $n_{\rho p} + 1 = i = 1, 2, \dots$  и собственных функций  $B_i^m(\rho; z)$ , зависящих от параметра  $z$ :

$$2E_i^m(z) = 2E_i^{|m|} \frac{c^2}{c^2 - z^2}, \quad 2E_i^{|m|} = \frac{(\alpha_{n_{\rho p} + 1, |m|})^2}{a^2} = \omega_{z; n_{\rho p}, |m|}^2(a)c^2, \quad \omega_{z; n_{\rho p}, |m|}(a) = \frac{\alpha_{n_{\rho p} + 1, |m|}}{ac},$$

$$B_{n_{pp}}^m(\rho; z) = \frac{\sqrt{2} J_{|m|}(\sqrt{2E_{n_{pp}+1,|m|}}(z)\rho)}{\rho_0(z) |J_{|m|+1}(\alpha_{n_{pp}+1,|m|})|}, \quad \rho_0(z) = a\sqrt{1-z^2/c^2},$$

где  $\alpha_{n_{pp}+1,|m|}$  – положительные нули функции Бесселя первого рода  $J_{|m|}(x_f)$  нумеруются квантовым числом  $n_p = n_{pp} + 1 = i = 1, 2, \dots$ . Решение  $\{2E_{n_{zp}}^{(im\sigma)}, \chi_{n_{zp}}^{(im\sigma)}(z)\}$  КЗ по медленной переменной  $z$ , характеризуемое квантовым числом  $n_{zp} = 0, 1, \dots$ :

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + 2E_i^m(z) - 2E_{n_{zp}}^{(im\sigma)}\right)\chi_{n_{zp}}^{(im\sigma)}(z) = 0, \quad \chi_{n_{zp}}(-c) = 0, \quad \chi_{n_{zp}}^\sigma(c) = 0, \quad \int_{-c}^c |\chi_{n_{zp}}^\sigma(z)|^2 dz = 1 \quad (2.3)$$

ищем в аналитическом виде по ТВ, используя разложение  $2E_i^m(z)$  в виде ряда по малому параметру  $\varepsilon = c^{-2}$ ,

$$2E_i^m(z) = (\omega_{z;n_{pp}}(a))^2 c^2 + (\omega_{z;n_{pp}}(a))^2 z^2 + (\omega_{z;n_{pp}}(a))^2 \sum_{j=1}^{j_{\max}} z^{2+2j} \varepsilon^j.$$

Область параметров КЗ (2.2) и (2.3), при которых применима ТВ для нижней части спектра, определяется распределением нулей присоединенных полиномов Лагерра и Эрмита для сплюнутой и вытянутой КТ, соответственно, а также сравнением с результатами численных расчётов решения с помощью программы KANTBP 2.0 [3], представленных на рисунках 5, 7. Аналитические выражения (3.6) и (3.7) для спектра ССКТ и ВСКТ, полученные с помощью алгоритма, реализующего схему ТВ используются ниже для вычисления коэффициента фотоабсорбции для ансамбля сферидальных КТ.

### 3. Коэффициент фотоабсорбции для ансамбля сферидальных КТ

Различие в спектрах энергии ССКТ и ВСКТ в зависимости от полуосей сфероида можно использовать для верификации рассмотренных моделей по коэффициенту абсорбции  $K(\omega^{ph}, \tilde{a}, \tilde{c},)$  системы идентичных полупроводниковых КТ:

$$\tilde{K}(\tilde{\omega}^{ph}, \tilde{a}, \tilde{c}) = \sum_{v,v'} \tilde{K}_{v,v'}(\tilde{\omega}^{ph}, \tilde{a}, \tilde{c}) = \tilde{A} \sum_{v,v'} \tilde{I}_{v,v'} \delta(\hbar\tilde{\omega}^{ph} - \tilde{W}_{vv'}), \quad (3.1)$$

$$\tilde{I}_{v,v'} = \left| \int \tilde{\Psi}_v^e(\tilde{r}; \tilde{a}, \tilde{c},) \tilde{\Psi}_{v'}^h(\tilde{r}; \tilde{a}, \tilde{c},) d\tilde{r} \right|^2, \quad \tilde{W}_{vv'} = \tilde{E}_g + \tilde{E}_v^e(\tilde{a}, \tilde{c}) + \tilde{E}_{v'}^h(\tilde{a}, \tilde{c}),$$

где  $\tilde{A}$  – величина пропорциональная квадрату матричных элементов дипольного момента по блоховским функциям (поскольку решения исходной задачи ищется в виде разложения по блоховским функциям с медленно изменяющимися в пределах постоянной решетки кристалла полупроводника неизвестными коэффициентами – огибающими функциями электрона и тяжелой дырки),  $\tilde{\Psi}_v^e(u)$  и  $\tilde{\Psi}_{v'}^h$  – собственные функции задачи (1.1) для электрона ( $e$ ) и тяжелой дырки ( $h$ ),  $\tilde{E}_v^e$  и  $\tilde{E}_{v'}^h$  – собственные значения энергии электрона ( $e$ ) и тяжелой дырки ( $h$ ), зависят от размера полуосей  $\tilde{c}, \tilde{a}$  для ССКТ (или  $\tilde{a}, \tilde{c}$  для ВСКТ), и адиабатический набор квантовых чисел  $v = [n_{zo}, n_{\rho o}, m]$  и  $v = [n'_{zo}, n'_{\rho o}, m']$  для ССКТ (или  $v = [n_{pp}, n_{zp}, m]$  и  $v' = [n'_{pp}, n'_{zp}, m']$  для ВСКТ), где  $m' = -m$ ,  $\tilde{E}_g$  – энергия запрещенной зоны полупроводниковой матрицы,  $\tilde{\omega}^{ph}$  – частота падающего света (электромагнитного излучения в оптическом диапазоне),  $\tilde{W}_{vv'}$  – энергия межзонного перехода (между зоной проводимости и валентной зоной), при которой  $\tilde{K}(\tilde{\omega}^{ph}, \tilde{a}, \tilde{c})$  имеет максимальное значение. Выражение (3.1), в приведённых атомных единицах приобретает вид:

$$\tilde{K}(\omega^{ph}, \tilde{a}, \tilde{c}) = \tilde{A} \tilde{E}_g^{-1} \sum_{v,v'} \tilde{I}_{v,v'} \delta[f_{v,v'}(u)], \quad f_{v,v'}(u) = \lambda_1 - (2E_g)^{-1} (2E_v^e(a, c) + 2E_{v'}^h(a, c)(\mu_h/\mu_e)), \quad (3.2)$$

где  $\lambda_1 = (\hbar\tilde{\omega}^{ph} - \tilde{E}_g)/\tilde{E}_g$  – энергия оптического межзонного перехода в единицах  $\tilde{E}_g$ ,  $2E_g = \tilde{E}_g/E_R^e$  (для GaAs  $E_g=1.43/(5.27 \cdot 10^{-3})$ ) – безразмерное значение энергии запрещённой зоны,  $2E_v^e = \tilde{E}_v^e/E_R^e$  и  $2E_v^h(\mu_h/\mu_e) = \tilde{E}_v^h/E_R^e$  – безразмерные значения энергии носителей зарядов электрона и дырки, заданные в приведённых атомных единицах для электрона  $E_R^e = \hbar^2/(2\mu_{e(h)}(a_B^e)^2)$ ,  $a_B^e = \kappa\hbar^2/(\mu_e e^2)$ . Для ансамбля ССКТ (или ВСКТ) вариация случайно распределённых значений малой полуоси  $c = u_o \bar{c}$  (или  $a = u_p \bar{a}$ ), зависящих от параметра  $u = u_o$  (или  $u = u_p$ ) вокруг соответствующих средних значений:  $\bar{c}$  (или  $\bar{a}$ ) при фиксированном значении большой полуоси  $a$  (или  $c$ ), задается подходящей функцией распределения  $P(u) = P(u_o)$  (или  $P(u) = P(u_p)$ ). Для вычисления коэффициента абсорбции в полупроводниковой матрице для системы КТ, имеющих неидентичные размеры малой полуоси:

$$\tilde{K}^p(\omega^{ph}, \bar{a}, \bar{c}) = \int \tilde{K}(\omega^{ph}, \bar{a}, \bar{c}, u_p) P(u_p) du_p, \quad \tilde{K}^o(\omega^{ph}, \bar{a}, \bar{c}) = \int \tilde{K}(\omega^{ph}, \bar{a}, \bar{c}, u_o) P(u_o) du_o \quad (3.3)$$

обычно используют функции распределения Гаусса:

$$P(u) \equiv P^G(u) = 1/\sqrt{2\pi}/\sigma \exp(-(u-1)^2/(2\sigma^2))$$

или Лифшица-Слэзова  $P(u) \equiv P^{LS}(u)$ :

$$P^{LS}(u) = \{3^4 e u^2 \exp(-1/(1-2u/3))/2^{5/3}/(u+3)^{7/3}/(3/2-u)^{11/3}, u \in (0, 3/2); 0, u \notin (0, 3/2)\}, \quad (3.4)$$

где  $\sigma^2 = \int (u-\bar{u})^2 P(u) du$  – дисперсия и  $\bar{u} = \int u P(u) du = 1$  – среднее значение  $u$ . Выполняя интегрирование в (3.3), с учётом известных свойств  $\delta$ -функции при подстановке выражения (3.2) в (3.3), получаем коэффициент абсорбции  $\tilde{K}(\omega^{ph}) = \tilde{K}^o(\omega^{ph}, \bar{a}, \bar{c})$  или  $\tilde{K}(\omega^{ph}) = \tilde{K}^p(\omega^{ph}, \bar{a}, \bar{c})$  для системы полупроводниковых ССКТ или ВСКТ, имеющих неидентичные размеры малой полуоси:

$$\frac{\tilde{K}(\omega^{ph})}{\tilde{K}_0} = \sum_{v,v',s} \frac{\tilde{K}_{v,v'}(\omega^{ph})}{\tilde{K}_0}, \quad \frac{\tilde{K}_{v,v'}(\omega^{ph})}{\tilde{K}_0} = \tilde{I}_{v,v'} \left| \frac{df_{v,v'}(u)}{du} \right|_{u=u_s} \int_{u_s}^{-1} P(u_s), \quad (3.5)$$

где  $\tilde{K}_0 = \tilde{A}^{-1} \tilde{E}_g$  – нормировочный множитель,  $u_s$  – корни уравнения  $f_{v,v'}(u_s) = 0$ .

В частности, для рассматриваемой модели ССКТ (ВСКТ) имеем следующие значения интегралов перекрытия межзонных переходов  $\tilde{I}_{v,v'} = \delta_{n_{\rho o}, n'_{\rho o}} \delta_{n_{z o}, n'_{z o}} \delta_{m, -m'}$  для ССКТ (или  $\tilde{I}_{v,v'} = (J_{1+|m|}(\alpha_{n_{\rho p}+1, |m|})/J_{1-|m|}(\alpha_{n_{\rho p}+1, |m|}))^2 \delta_{n_{z p}, n'_{z p}} \delta_{n_{\rho p}, n'_{\rho p}} \delta_{m, -m'}$  для ВСКТ), и правила отбора по квантовым числам:  $n_{z o} = n'_{z o}$ ,  $n_{\rho o} = n'_{\rho o}$ , и  $m = -m'$  (или  $n_{\rho p} = n'_{\rho p}$ ,  $n_{z p} = n'_{z p}$  и  $m = -m'$ ). Тогда, для функции  $f_{v,v'}(u)$ , необходимой для вычисления коэффициента абсорбции (3.5), в  $b_{max}$ -том порядке приближения ТВ решения КЗ (2.2) или (2.3), имеем разложение:

$$f_{v,v'}(u) = \lambda_1 - \sum_{j=0}^{b_{max}} \check{E}^{(j)} u^{j-2},$$

где коэффициенты  $\check{E}^{(j)}$  имеют вид для ССКТ:

$$\begin{aligned} \check{E}^{(j)} &= (2E_g)^{-1} E_{io}^{(j)} \omega_{\rho; n_o}^{2-j}(\bar{c})(1 + \mu_e/\mu_h), \quad \omega_{\rho; n_o}(\bar{c}) = \pi n_o/(a\bar{c}), \\ E_{io}^{(0)} &= a^2/4, \quad E_{io}^{(1)} = (2n_{\rho o} + |m| + 1), \quad E_{io}^{(2)} = (6n_{\rho o} |m| + 2 + 6n_{\rho o} + 6n_{\rho o}^2 + |m|^2 + 3|m|)a^{-2}, \quad (3.6) \\ E_{io}^{(3)} &= 3(6n_{\rho o} + 3|m| + 2 + |m|^2 + 6n_{\rho o}^2 + 6n_{\rho o} |m| + 4n_{\rho o}^3 + 6|m|n_{\rho o}^2 + 2|m|^2 n_{\rho o})a^{-4}/2, \end{aligned}$$

и для ВСКТ:

$$\check{E}^{(j)} = (2E_g)^{-1} E_{ip}^{(j)} \omega_{z;n_{pp}|m|}^{2-j}(\bar{a})(1 + \mu_e/\mu_h), \quad \omega_{z;n_{pp}|m|}(\bar{a}) = \alpha_{n_{pp}+1,|m|}(\bar{a}c), \quad (3.7)$$

$$E_{ip}^{(0)} = c^2, \quad E_{ip}^{(1)} = (2n_{zp} + 1), \quad E_{ip}^{(2)} = 3(2n_{zp} + 2n_{zp}^2 + 1)c^{-2}/4, \quad E_{ip}^{(3)} = 3(3n_{zp}^2 + 7n_{zp} + 2n_{zp}^3 + 3)c^{-4}/16.$$

Для рассматриваемой модели собственные значения энергии  $2E_{io}$  и  $2E_{ip}$  монотонно зависят от параметра  $u$ , поэтому алгебраическое уравнение  $f_{v,v}(u) = 0$  имеет только одно решение ( $s=1$ ). Используя обозначения  $\lambda_1 = \lambda_1$  для  $b_{max} = 1$ , и  $\lambda_1 = \lambda_1 - E_{io}^{(2)}$  или  $\lambda_1 = \lambda_1 - E_{ip}^{(2)}$  для  $b_{max} \geq 2$ , перепишем это уравнение в приближении до третьего порядка ТВ ( $b_{max} \leq 3$ ):

$$f_{v,v}(u) = \lambda'_1 - \check{E}^{(0)}u^{-2} - \check{E}^{(1)}u^{-1} - \check{E}^{(3)}u = 0,$$

которое имеет требуемые корни в первом, втором и третьем порядках ТВ по  $u_1 = u_1^{(b_{max})}$ :

$$u_1^{(1,2)} = (2\lambda_1)^{-1}(\check{E}^{(1)} + ((\check{E}^{(1)})^2 + 4\lambda_1\check{E}^{(0)})^{1/2}), \quad u_1^{(3)} = u^{(2)} + \check{E}^{(3)}(u_1^{(2)})^4 / (2\check{E}^{(0)} + \check{E}^{(1)}u_1^{(2)}).$$

Для распределения Лифшица-Слэзова (3.4) на рис. 8 показаны коэффициенты полной абсорбции  $\tilde{K}(\omega^{ph})/\tilde{K}_0$  и коэффициенты частичной абсорбции  $\tilde{K}_{v,v}(\omega^{ph})/\tilde{K}_0$ , которые формируют соответствующие частные суммы (3.5) по фиксированному набору квантовых чисел  $\nu$  при  $m = -m' = 0$ . Можно видеть, что суммирование по квантовым числам  $n_{zo}$  (или  $n_{pp}$ ), нумерующих нули (узловые линии) собственной функции по быстрой переменной даёт соответствующие основные максимумы полного коэффициента абсорбции для ансамбля КТ, имеющих неидентичные размеры малых полуосей, тогда как суммирование по квантовому числу  $n_{po}$  (или  $n_{zp}$ ), нумерующему нули собственной функции по медленной переменной, приводит к возрастанию амплитуды максимумов и к появлению вторичных максимумов в случае «разреженных» уровней энергии (т.е. при значительном расстоянии между уровнями) модели.

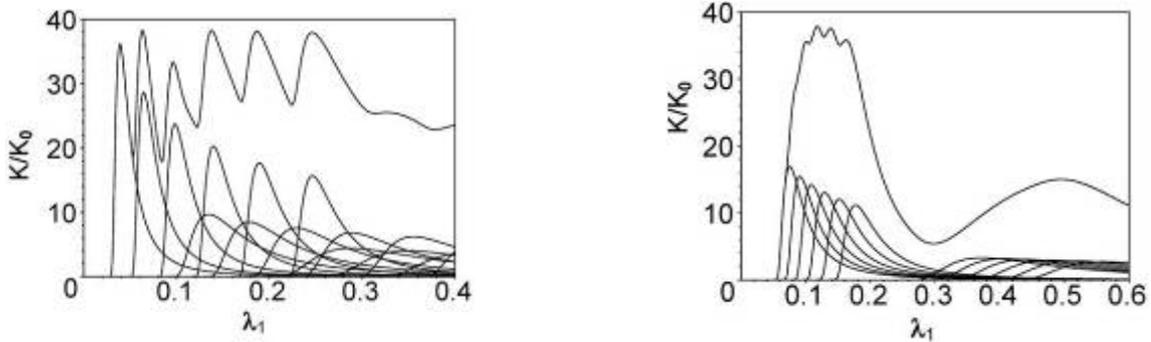


Рис. 8. Коэффициенты полной абсорбции  $\tilde{K}(\omega^{ph})/\tilde{K}_0$  (верхняя кривая) и коэффициенты частичной абсорбции  $\tilde{K}_{v,v}(\omega^{ph})/\tilde{K}_0$  (нижние кривые), которые формируют соответствующие частные суммы (3.5) по фиксированному набору квантовых чисел  $\nu$  при  $m = -m' = 0$ . Слева ССКТ, справа ВСКТ

В режиме сильного размерного квантования частота межзонных переходов между уровнями с  $n_o = 1, n_{po} = 0, m = 0$  в первом приближении ТВ, при фиксированных значениях  $\tilde{a} = 2.5a_e$  и  $\tilde{c} = 0.5a_e$  равна  $\omega_{100}^{ph} = 2.17 \times 10^{13} s^{-1}$  (с точностью порядка 3%) для ССКТ, а частота межзонных переходов между уровнями с  $n_p = 1, n_{zp} = 0, m = 0$  в первом приближении ТВ, при фиксированных значениях  $\tilde{c} = 2.5a_e$  и  $\tilde{a} = 0.5a_e$  равна  $\omega_{100}^{ph} = 3.32 \times 10^{13} s^{-1}$  (с точностью порядка 0.5%) для ВСКТ, что в обоих случаях соответствует инфракрасной области спектра электромагнитного излучения. С уменьшением полуоси пороговая энергия возрастает, потому что возрастает эффективная ширина

запрещенной зоны  $E_g$  вследствие усиления размерного квантования (рис. 9). Следовательно, пороговая частота для ВСКТ больше, чем для ССКТ, потому что размерное квантование в ВСКТ реализуется по двум направлениям в плоскости (x,y) эффективно больше, чем в ССКТ только по одному направлению вдоль оси z при сходных размерах малых полуосей. Более точные вычисления уровней энергии выявляют существенное различие в поведении коэффициента абсорбции в первом порядке ТВ – эквидистантной части спектра по квантовому числу медленной подсистемы, и во втором порядке ТВ – неэквидистантной части спектра по квантовому числу медленной подсистемы. В результате при использовании значений энергии, вычисленных во втором порядке ТВ, вторичные максимумы перекрываются с первичными максимумами для ССКТ, в отличие от ВСКТ (рис. 8). Таким образом, более точные вычисления зависимости коэффициента фотоабсорбции от частоты межзонных переходов в полупроводниковой матрице системы ССКТ и ВСКТ, имеющих неидентичные размеры малых полуосей, можно использовать для верификации вышерассмотренных и других моделей.

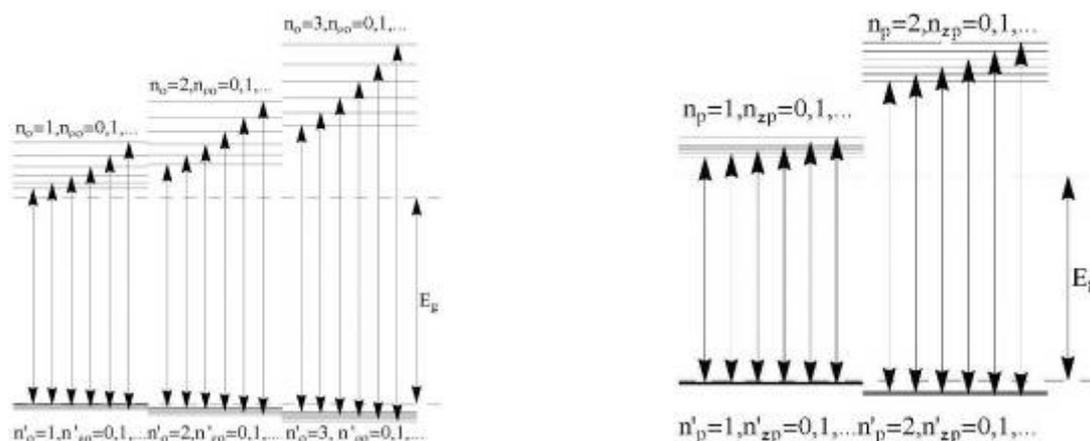


Рис. 9. Диаграммы межзонных переходов соответствующих Рис. 8, слева ССКТ, справа ВСКТ,

$E_g$  – ширина запрещённой зоны

## Заключение

Представленные результаты можно использовать для оценки границы энергии фотоабсорбции и коэффициента фотоабсорбции для ансамбля сфероидальных квантовых точек со случайным распределением малой полуоси вокруг её среднего значения. Выявленная зависимость нижней части спектра от малой оси сфероида, а также коэффициента абсорбции от функции распределения значений полуосей позволяют из сравнения с экспериментальными данными оценить характерные размеры сфероидальных квантовых точек. Приближения для нижней части спектра полученные в аналитическом виде можно также применять для интерпретации спектров моделей сильно деформированных ядер. Разработанные методы, символьно-численные алгоритмы и комплексы программ [2-10], применимы для решения краевых задач дискретного и непрерывного спектра уравнений шрёдингеровского типа и анализа спектральных и оптических характеристик квантовых ям, квантовых проволок и квантовых точек во внешних полях.

Работа частично поддержана РФФИ (проекты 10-01-00200 и 11-01-00523).

## Список литературы

1. Моисеев К.Д., Пархоменко Я.А., Анкудинов А.В., Гущина Е.В., Михайлова М.П., Титков А.Н., Яковлев Ю.П. Квантовые точки InSb/InAs, полученные методом жидкофазной эпитаксии // Письма в ЖТФ. – 2007. – №33. – С. 50-57.
2. Дербов В.Л., Серов В.В., Виницкий С.И., Гусев А.А., Чулуунбаатар О., Казарян Э.М., Саркисян А.А. О решении низкоразмерных краевых задач квантовой механики методом Канторовича - приведение к обыкновенным дифференциальным уравнениям // Известия Саратовского Университета, Серия Физика. – 2010. – №10. – С. 4-17.

3. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G. KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach // Computer Physics Communications – 2008. – №179. – Pp. 685-693.
4. Gerdt V., Gusev A., Kaschiev M., Rostovtsev V., Samoylov V., Tupikova T., Vinitsky S. A symbolic-Numerical Algorithm for Solving the Eigenvalue Problem for a Hydrogen Atom in Magnetic Field // Lecture Notes in Computer Science – 2006. – №194. – Pp. 205-218.
5. O. Chuluunbaatar, Gusev A.A., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G., Kaschiev M.S., Serov V.V. POTHMF: A program for computing potential curves and matrix elements of the coupled adiabatic radial equations for a hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field // Computer Physics Communications – 2008. – №178. – Pp. 301-330.
6. Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A., Vinitsky S.I., Derbov V.L., Serov V.V. Symbolic-Numeric Algorithms for Computer Analysis of Spheroidal Quantum Dot Models // Lecture Notes in Computer Science. – 2010. – №6244. – Pp. 106-122.
7. Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Gusev A.A., Rostovtsev V.A. Symbolic-Numerical Algorithms for Solving Parabolic Quantum Well Problem with Hydrogen-Like Impurity // Lecture Notes in Computer Science. – 2009. – №5743. – Pp. 334-349.
8. Chuluunbaatar O., Gerdt V., Kaschiev M., Rostovtsev V., Samoylov V., Tupikova T., Vinitsky S. A Symbolic-Numerical Algorithm for Solving the Eigenvalue Problem for a Hydrogen Atom in Magnetic Field: Cylindrical Coordinates // Lecture Notes in Computer Science. – 2007. – №4770. – Pp. 118-133.
9. Gusev A.A., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A. Symbolic-numerical algorithms to solve the quantum tunneling problem for a coupled pair of ions // Lecture Notes in Computer Science. – 2011. – №6885. – Pp. 175-191.
10. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G. ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem // Computer Physics Communications. – 2009. – №180. – Pp. 1358-1375.